

**HARTREE-FOCK-RECHNUNGEN ZUM $A^{1/3}$ -TERM
IN DER MASSENFORMEL
(Krümmungs- und Kompressionsenergien)**

Hubertus v. Dewitz

1976



Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41555611_0092

HARTREE - FOCK - RECHNUNGEN ZUM $A^{1/3}$ - TERM

IN DER MASSENFORMEL

(Krümmungs- und Kompressionsenergien)

I n a u g u r a l - D i s s e r t a t i o n

zur

Erlangung des Doktorgrades des

Fachbereiches Physik der

Ludwig - Maximilians - Universität

zu München

vorgelegt von

Hubertus v. Dewitz

aus Berlin

München

November 1975



1. Berichterstatter: Professor Dr. G. Süßmann
2. Berichterstatter: Privatdozent Dr. F. Rieß

Tag der mündlichen Prüfung: 19. Februar 1976

Inhalt

Seite

1 Einleitung

1.1 Beschreibung der Literatur 1

1.2 Beschreibung der vorliegenden Arbeit 7

2 Makroskopische Kernmodelle

2.1 Kernmassen und Massenverteilung in Kernen 10

2.2 Tropfenmodell 13

2.3 Tröpfchenmodell 15

3 Mikroskopische Theorie

3.1 Zweiteilchenwechselwirkung in Kernmaterie 17

3.2 Renormierung 20

3.3 K - Matrix in Lokaler Dichtenäherung 23

3.4 Phänomenologische Potentiale 25

3.5 Grundzustandsenergie in 1. störungstheore-
tischer Näherung 26

3.6 Hartree - Fock - Theorie mit dichteab-
hängigen Potentialen 31

4 Massenformel unter mikroskopischen Gesichtspunkten

4.1 Vorbemerkung 38

4.2 Massenformel des Tropfenmodells 40

4.3 Massenformel des Tröpfchenmodells 43

4.4 Drei Theoreme 51

4.5 Krümmungsenergie 55

4.6 Hartree - Fock - Theorie der semiinfiniten
Kernmaterie 61

	Seite
5 Spezialisierung auf das Moszkowski - Potential (MDI)	
5.1 Gesamtenergie und Hartree - Fock - Gleichungen	64
5.2 Energie - Dichtefunktional	69
5.3 Oberflächenspannung und Krümmungsenergie	74
6 Rechnungen	
6.1 MDI - Potentialkonstanten und - Sättigungseigen- schaften	79
6.2 Numerische Behandlung des Hartree - Fock - Problems der semiinfiniten Kernmaterie	84
7 Ergebnisse	
7.1 Oberflächenenergie	89
7.2 Krümmungs- und Kompressionsenergie	93
8 Zusammenfassung	99
Anhang 1: Stationaritätseigenschaften der Hartree - Fock- Oberflächenspannung	103
Anhang 2: Das Theorem von Hohenberg und Kohn	117
Anhang 3: Beispiel für die Berechnung des dynamischen Krümmungsterms	121
9 Abbildungen	124
10 Literaturverzeichnis	136

1 Einleitung

1.1 Beschreibung der Literatur

Seit es C.F.v. Weizsäcker¹⁾ gelang, die der Nukleonenbindung entsprechenden (Grundzustands -) Gesamtenergien E der Atomkerne als Funktion der Protonen - und Neutronenzahlen Z und N ($A = N+Z$) näherungsweise durch die Massenformel

$$E = \alpha_c A + \beta_c A^{2/3} + \frac{3e^2}{5\pi_c} \frac{Z^2}{A^{4/3}} + \frac{1}{2} \gamma_c \frac{(N-Z)^2}{A} \quad (1.1.1)$$

darzustellen, wurden zahlreiche Versuche unternommen, die in dieser Gleichung auftretenden Koeffizienten zu berechnen bzw. (1.1.1) durch Hinzunahme weiterer Terme systematisch zu verfeinern.

In der vorliegenden Arbeit sollen Begründungen von Korrekturen studiert werden, die der Addition eines zusätzlichen $\gamma_c A^{1/3}$ - Termes zu (1.1.1) entsprechen. Ein solcher Energiebeitrag spielt in der Theorie der Kernspaltung eine wichtige Rolle. Möglicherweise ist er auch im Zusammenhang mit Fragen der Metastabilität überschwerer Kerne von Bedeutung. - Wir sehen im folgenden dabei von einer Diskussion von Größen ab, die Unterschiede zwischen Protonen und Neutronen berücksichtigen, setzen $N = Z$ und denken uns die Coulombkraft abgeschaltet.

+) In dieser Form findet sich die Gleichung erst bei H.A. Bethe und R.F. Bacher.²⁾

Während der erste (der Teilchenzahl proportionale) Summand in (1.1.1) dem Energiebeitrag des homogenen Inneren grosser Kerne entspricht - seine Berechnung ist eine Aufgabe der Theorie der "homogenen Kernmaterie" - berücksichtigen $A^{2/3}$ - und $A^{1/3}$ - Terme Kernoberflächen bzw. Krümmungs- und Kompressionseffekte, deren Literatur wir hier kurz beschreiben wollen.

In einem Modell der unendlich ausgedehnten ebenen Oberfläche ("semiinfinite Kernmaterie"), in dem die Kernkrümmung nicht beachtet wird, berechnet W.J. Swiatecki³⁾ die Dichtematrix als Summe über realistische Einteilchenwellenfunktionen und ermittelt so die Gesamtenergie in einem endlichen Volumen der Kernoberfläche. Hiervon subtrahiert er die Gesamtenergie eines Volumens homogener Kernmaterie mit der gleichen Teilchenzahl und erhält somit nach deren Elimination den Oberflächenenergie - ($A^{2/3}$ -) Koeffizienten β_c .

Arbeiten, die sich an das Verfahren von Swiatecki anlehnen, sind die der Autoren^{4-21,81)}. Einige unternehmen es, für semiinfinite Kernmaterie unter Verwendung von mehr oder weniger realistischen Zweiteilchenwechselwirkungen die Dichtematrix exakt zu berechnen^{9,10,15,17,20,21,81)} oder systematische Annäherungen an diese anzustreben.^{6-8,16)} Andere versuchen, die von Swiatecki verwendeten Schalenmodell-Wellenfunktionen im Rahmen des Thomas - Fermi - Verfahrens durch ebene Wellen zu ersetzen. Hierdurch wird die Energiedichte eine Funktion der Teilchendichte. Dieses Vorgehen ist durch das Theorem von P. Hohenberg und W. Kohn²²⁾

prinzipiell gerechtfertigt, das die Existenz einer solchen Funktion beweist. Verschiedene Autoren vergleichen die Resultate derartiger TF - Rechnungen mit den Ergebnissen der Hartree - Fock - Theorie^{15,17)}. Um die TF - Näherung der Energiedichte in der inhomogenen Kernoberfläche zu verbessern, hat man versucht, Dichtegradiententerme hinzuzufügen.^{4,5)} -

P.J. Hill und J.A. Wheeler²³⁾ berechnen die Energie eines Fermigas, das in einen Kasten mit spiegelnden Wänden eingeschlossen ist. Die Anzahl A und die Gesamtenergie E der Teilchen hängen dann vom Kastenvolumen ab. Unter Berücksichtigung dieser funktionalen Zusammenhänge ergibt sich eine Entwicklung der Gesamtenergie nach Potenzen von $A^{1/3}$.

Die Methoden von Hill und Wheeler wurden auch auf sphärische Gebilde angewandt²⁴⁾ sowie an diversen anderen Kerngestalten überprüft. Die spiegelnden Wände wurden durch weiche Wände ersetzt^{24,26)}. G. Süßmann²⁷⁾ konnte zeigen, dass das Verfahren dem von Swiatecki gleichkommt, wenn dafür gesorgt wird, dass die Teilchendichte im Kasteninneren beim Grenzübergang grosser Volumina festgehalten wird.

J.C. Reynolds²⁸⁾ hat Verbesserungen in Hinblick auf eine genauere Behandlung des Vielteilchenproblems vorgeschlagen. Oberflächenschwingungen wurden von P.J. Feibelmann²⁹⁾ unter hydrodynamischen Aspekten untersucht. Den Einfluss der Spinabhängigkeit der Zweiteilchenwechselwirkung auf die Kernoberfläche analysierte W. Stocker³⁰⁾.

Schon die Arbeit von Hill und Wheeler²³⁾ lieferte einen Krümmungsbeitrag der Oberfläche zur Gesamtenergie. Dieser sowie ein ebenfalls zu $A^{1/3}$ - proportionaler Kompressions-term tritt bei V.M. Strutinski und A.S. Tyapin³¹⁾ in einem TF - Modell auf. Insgesamt ergibt sich $\gamma_c = 15.0 \text{ MeV}$ ³²⁾.

Ebenfalls in TF - Rechnung erhält W.D. Myers¹³⁾ 7.0 MeV ; er beweist in dieser Arbeit, dass die A - Abhängigkeit der Teilchendichte keinen Beitrag zu γ_c liefert. S. Knaak³³⁾ berechnet Krümmungs- und Kompressionsenergien in HF - Näherung, indem er eine systematische Entwicklung der Dichtematrix nach Potenzen der Kernkrümmung anstrebt. Er erhält je nach Kompression Werte zwischen -45 MeV und $+20 \text{ MeV}$. -

TF - Rechnungen wurden auch von W. Stocker³⁴⁾ und von C.D. Bennett und D.G. Ravenhall³⁵⁾ angestellt; die Ergebnisse dieser Autoren liegen zwischen 6 und 7 MeV . M. Dworzecka und S. Moszkowski³⁶⁾ erhalten ähnliche Resultate unter Verwendung sehr einfacher Annahmen über die Gestalt des Energie-Dichtefunktional, mit dem sie unter Zugrundelegen einer Fermi - Dichteverteilung mit variablen Radius R die Gesamtenergie nach Potenzen von R entwickeln.

Es sind noch verschiedene andere Möglichkeiten diskutiert worden, γ_c zu bestimmen. - Wie erwähnt, spielt der $A^{1/3}$ - Term bei Spaltvorgängen eine gewisse Rolle. Bei deformier-

ten Kernen sind die in Gl. (1.1.1) auftretenden Summanden - und ebenso dann nach Hinzufügung auch der $A^{1/3}$ - Term - mit Korrekturfaktoren zu multiplizieren, die die Kerngestalt berücksichtigen. Die so modifizierte Massenformel kann dazu benutzt werden, die Kern - Deformationsenergie zu berechnen und Sattelpunkte und Spaltbarrieren zu ermitteln. - H.v. Groote und E. Hilf³⁷⁾ haben umgekehrt γ_c durch Anpassung an bekannte Spaltbarrieren bestimmt, sie erhielten 6 - 8 MeV. Als obere Grenze gibt R.W. Hasse³⁸⁾ einen Wert von 5 MeV an. -

H. Schultheis und R. Schultheis sowie G. Süßmann³⁹⁾ berücksichtigen die Kernkrümmung bei deformierten Kernen dadurch, dass sie in jedem Punkt der Oberfläche die lokale Krümmung bestimmen und diesen Oberflächenpunkt mit einem Gewicht versehen, das sich aus dem Vergleich mit den bekannten Energien sphärischer Kerne mit eben dieser Krümmung ergibt.

Neuerdings versucht man, γ_c dadurch zu bestimmen, dass man die Koeffizienten der Massenformel (1.1.1) an die mit HF - Methoden berechneten Grundzustandsenergien einer grossen Anzahl von Kernen anpasst. J.W. Negele und D. Vautherin⁴⁰⁾ erhalten für γ_c auf diese Weise 11.7 MeV, während die Ergebnisse von M. Dworzecka und S. Moszkowski³⁶⁾ zwischen 5 und 7 MeV liegen. Allerdings bringen die wegen der Schalenfluktuationen notwendigen Mittelungsprozeduren gewisse Unsicherheiten mit ins Spiel.-

Es sei zum Schluss noch auf die klassischen Flüssigkeits-
theorien hingewiesen, in denen ebenfalls krümmungsabhän-
gige Oberflächenenergiebeiträge diskutiert werden.⁴¹⁻⁴⁴⁾

1.2 Beschreibung der vorliegenden Arbeit

In Kapitel 2 wird die Entwicklung (1.1.1) der Grundzustandsenergie E_A von Atomkernen nach der Teilchenzahl durch einen kurzen phänomenologischen Überblick über Kernmassen und Massenverteilungen in Kernen begründet. Letztere führen zu "makroskopischen" Tropfen- und Tröpfchenmodellen.

Diese werden in Kapitel 3 in "mikroskopischer" Betrachtungsweise auf die Sättigungseigenschaften der Kernkräfte zurückgeführt. Es folgt die Aufstellung der ersten störungstheoretischen Näherung für E_A sowie der zugehörigen Har-tree - Fock - Gleichungen. Den Einfluss kurzreichweitiger Korrelationen und die Tensorkraft berücksichtigen wir hierbei durch eine "effektive" Dichteabhängigkeit der zugrundeliegenden Bruecknerschen $K -$ Matrix.

In Kapitel 4 wird E_A in Volum - und Oberflächenenergie-Anteile zerlegt; diese Größen sind näherungsweise zu A bzw. zu $A^{2/3}$ proportional. Die schwache Teilchenzahlabhängigkeit der Proportionalitätsfaktoren führt zu $A^{1/3}$ - Termen in (1.1.1). Man unterscheidet zwischen Beiträgen, die durch die Kompression des Kerninneren infolge der Oberflächenspannung, und solchen, die durch die Krümmungsabhängigkeit der letzteren zustandekommen. Die Berechnung dieser Größen wird durch das Theorem von P. Hohenberg und W. Kohn²²⁾ erleichtert, nach dem die Energiedichte eine Funktion der Teilchendichte ist. Als wesentlich er-

weist sich hier auch eine Stationaritätsaussage von W.D. Myers und W.J. Swiatecki¹³⁾, die im Anhang 1 in der Grenze $A \rightarrow \infty$ für HF - Systeme mit dichteabhängiger Zweiteilchen - Wechselwirkung unabhängig von diesen Autoren bewiesen wurde. Es gelingt so, das Problem auf die Berechnung von HF - Energie- und Teilchendichten der ebenen Oberfläche ("semiinfinite Kernmaterie") zu reduzieren. Die "praktische" Voraussetzung hierfür ist allerdings, dass das exakte Energie-Dichtefunktional oder eine geeignete Näherung für dieses explizit vorliegt.

In Kapitel 5 wählen wir nun für unsere HF - Rechnungen die von S.A. Moszkowski¹⁷⁾ als Variante der Skyrme - Wechselwirkung entwickelte impuls- und dichteabhängige Kontaktkraft (MDI) als effektiven Ansatz für die K - Matrix.

Die Energiedichte ist dann eine Funktion der Teilchendichte n und der kinetischen Energiedichte τ . Letztere ist aber durch n eindeutig bestimmt: $\tau = \tau(n)$

Da die allgemeine Gestalt dieser funktionalen Abhängigkeit nicht bekannt ist, wählen wir für τ bei der Berechnung von Krümmungsenergien den Ansatz von C.F. v. Weizsäcker¹⁾, jedoch multiplizieren wir den Gradiententerm mit einem Faktor, den wir numerisch an die Ergebnisse exakter HF - Berechnungen der Oberflächenspannung der semiinfiniten Kernmaterie anpassen.

In Kapitel 6 werden die Sättigungseigenschaften der MDI in Abhängigkeit von den Potentialparametern untersucht und

Fragen erörtert, die mit der numerischen Behandlung des semiinfiniten HF - Problem zusammenhängen.

Kapitel 7 bringt die Diskussion der Ergebnisse der numerischen Rechnungen; in Kapitel 8 werden die behandelten Fragen nochmals zusammenfassend dargestellt.

2 Makroskopische Kernmodelle

2.1 Kernmassen und Massenverteilung in Kernen

Die Masse M eines nicht angeregten Atomkernes, der aus Z Protonen und N Neutronen besteht, ist merklich kleiner als die Summe der Einzelmassen seiner Konstituenten:

$$M = Z m_p + N m_n - \Delta m. \quad (2.1.1)$$

m_p bzw. m_n ist hierbei die Ruhemasse des Protons bzw. des Neutrons.

Der "Massendefekt" entspricht über die relativistische Beziehung

$$B = \Delta m c^2 \quad (2.1.2)$$

der Kern - Bindungsenergie B von $A = N + Z$ Nukleonen.

Dann ist $E = -B$ die der Nukleonenbindung entsprechende Kern - Grundzustandsenergie.⁺⁾

Experimentell kann Δm bzw. B bei sehr langlebigen Kernen z.B. durch massenspektro-⁴⁵⁾ bzw. -synchronometrische⁴⁶⁾ Methoden bestimmt werden. Für kurzlebige Kerne eignet sich hierfür die Analyse gewisser Kernreaktionen und -zerfälle. Modernere Massentabellen⁴⁷⁾ geben für viele Elemente die Werte von B mit einem mittleren Fehler

^{+) In der Literatur wird verschiedentlich auch E als Bindungsenergie bezeichnet¹¹⁶⁾.}

von unter 0.002 % an. Für Kerne weit von der Stabilitätslinie ist die Messgenauigkeit im allgemeinen geringer.

Die Bindungsenergie pro Nukleon lässt sich als Funktion der Teilchenzahl folgendermassen grob charakterisieren:

- 1) Sie steigt für die leichtesten Kerne ($A \leq 4$) sehr rasch von 0 bis etwa 6 MeV an.
- 2) Sie steigt für leichtere Kerne ($A = 4 \dots 60$) dann langsam weiter bis ungefähr 8.8 MeV.
- 3) Sie sinkt für die schweren Kerne ($A = 60 \dots 250$) sehr langsam wieder bis auf etwa 7.5 MeV ab.

Diesen mittleren Trend des Verlaufs von B/A als Funktion der Teilchenzahl überlagert sich eine "Feinstruktur", in der sich zahlreiche weitere systematische Züge entdecken lassen. So ergibt sich z.B., dass die Bindungsenergie pro Nukleon mit zunehmender Differenz von N und Z schwach abfällt (Neutron - Proton - Asymmetrie). Ausserdem ist B/A für $\{gg\}$ - Kerne etwas grösser als für $\{ug\}$ - Kerne u. s. w.

Es stellt sich heraus, dass es für eine modellmässige Beschreibung der geschilderten Verhältnisse nützlich ist, die Massenverteilung innerhalb der Atomkerne zu betrachten.

Elektronenstreuexperimente an grossen sphärischen Atomkernen⁴⁹⁾ zeigen:

1) Der Kern kann grob in zwei Bereiche eingeteilt werden.

Im "Inneren" ist die Ladungsverteilung (als die Protonendichte) konstant; in der "Oberflächenzone", deren Dicke für die meisten grossen Kerne ca. 2.4 fm beträgt, sinkt sie von 90 % auf 10 % ihres Maximalwertes ab.

2) Die Ladungsdichte im Kerninneren ist für grosse Kerne näherungsweise von der Massenzahl unabhängig. Auch der Verlauf der Ladungsdichte in der Oberflächenzone hängt nicht sehr stark von A ab.

Neuere Experimente⁵⁰⁾ lassen jedoch vermuten, dass diese glatte Ladungsverteilung durch kleine Oszillationen überlagert wird. Deren maximale Amplitude beträgt z.B. bei Pb^{208} ca. 1 % des Wertes der Ladungsdichte im Kerninneren.

Es gibt Hinweise dafür, dass die Neutronenverteilung in ähnlicher Weise charakterisiert werden kann.

Diese phänomenologischen Grundtatsachen legen gewisse modellmässige Beschreibungen des Atomkernes nahe, die wir makroskopisch nennen wollen, weil sie sich mit kollektiven Freiheitsgraden (z.B. Teilchenzahl, Oberflächendicke u.s.w.) beschäftigen. Mikroskopische Betrachtungsweisen gehen dagegen von dem Verhalten der einzelnen Nukleonen im Kern aus und versuchen so, die Aussagen der makroskopischen Theorie im Mittel zu begründen.

2.2 Tropfenmodell

- 1) Das makroskopische Tropfenmodell des Atomkernes geht auf G. Gamow⁵¹⁾ zurück. - Die Tatsache der annähernden Konstanz der Bindungsenergie pro Nukleon, B/A , für $A > 4$ sowie die der Teilchendichte für alle schweren Kerne erinnert an die Verhältnisse in grossen sphärischen Tropfen einer inkompressiblen molekularen Flüssigkeit: die Dichte im Inneren ist konstant und hat für alle Tropfengrössen denselben Wert. Die Bindungsenergie (Kondensationsenergie) ist dem Volumen $V = \frac{4\pi}{3} R^3$, also der Anzahl A der im Tropfen enthaltenen Bindungspartner proportional.
- 2) Wick⁵²⁾ wies darauf hin, dass der langsame Anstieg von B/A zwischen $A = 4$ und $A = 60$ in dieses Bild passt, wenn man annimmt, dass eine Oberflächenspannung des Kernetropfens existiert, die der Grösse seiner dünnen Oberflächenzone, also ungefähr $4\pi R^2 \sim A^{2/3}$ proportional ist. Die Nukleonen sind nämlich wegen der Inhomogenität der Dichteverteilung dort schwächer gebunden, als im Kerninneren, was zu einem mit wachsender Teilchenzahl wie $A^{-1/3}$ verschwindenden negativen Beitrag zu B/A führt.
- 3) Das erneute langsame Abfallen von B/A für $A > 60$ kann durch das mit zunehmender Protonenzahl Z anwachsende elektrostatische Potential erklärt werden.⁵¹⁾ Es ist $Z^2/A^{1/3}$ proportional, also der Coulombenergie eines homogenen, Z -fach geladenen sphärischen Tropfen mit dem Radius $R = r_c A^{1/3}$.

Nach C.F. v. Weizsäcker¹⁾, H.A. Bethe und R.F. Bacher²⁾ kann die Bindungsenergie B bzw. die Grundzustandsenergie E eines Kernes mit Z Protonen und N Neutronen näherungsweise durch die Massenformel

$$-B = E = \alpha_c A + \beta_c A^{2/3} + \frac{3e^2}{5r_c} \frac{Z^2}{A^{1/3}} + \frac{1}{2} \epsilon_c \frac{(N-Z)^2}{A} \quad (2.2.1)$$

beschrieben werden. Der letzte Term in Gl. (2.2.1) berücksichtigt einen zusätzlichen Energiebeitrag, der ebenfalls durch die Tropfen-Analogie begründet werden kann; er folgt aus der Neutron - Proton - Asymmetrie. -

Es sind in der Literatur zahlreiche systematische Verfeinerungsvorschläge für (2.2.1) gemacht worden. Man hat z.B. versucht, die im Rahmen des Tropfenmodells nicht mehr erklärbaren Unterschiede der Bindungsenergien bei gg, ug und uu - Kernen sowie andere typische Schaleneffekte in einer Massenformel zu berücksichtigen⁵³⁾. Diejenige von P.A. Seeger⁵⁴⁾ gibt die empirischen Bindungsenergien für schwere Elemente inzwischen mit einem Fehler von nur noch etwa 0.04 % wieder.

Verfeinerungen von Gl. (2.2.1) sind jedoch auch möglich, wenn man die Tropfenanalogie des Atomkernes noch weiter verfolgt, wie es im Tröpfchenmodell geschieht.

2.3 Tröpfchenmodell

Das Tropfenmodell führt in (2.2.1) zu Termen der Ordnung A und $A^{2/3}$, die die Bedeutung von Volum- und Oberflächenbeiträgen zur Bindungsenergie der Atomkerne besitzen.

Dieses makroskopische Modell kann in Richtung auf mikroskopische Theorien verfeinert werden. Letztere gehen ja von der Dynamik der einzelnen Nukleonen aus und können somit auch typische Schaleneffekte der Ordnung A^0 53,55,56) erklären. Der Schritt zum Tröpfchenmodell von W.D. Myers und W.J. Swiatecki¹³⁾ besteht nun darin, dass man die "endliche Grösse" des Tropfens, also das Verhältnis des mittleren Nukleonenabstandes zum Kernradius berücksichtigt.

Für die Massenformel bedeutet dies, dass man Energiebeiträge der Ordnung $A^{1/3}$ mit einbezieht. Diese haben physikalisch ihren Ursprung darin, dass ein kleiner Tropfen durch die Oberflächenenergie eine Kompression der Teilchendichte des Innenbereiches erfährt und ausserdem die Oberflächenenergie durch die Krümmung beeinflusst wird.⁴³⁾

Im Rahmen des Tröpfchenmodells kommt es - abgesehen von dem $A^{1/3}$ -proportionalen Zusatzglied in (2.2.1) - auch noch zu weiteren Kopplungstermen zwischen $N - Z$ und A , die hier allerdings nicht diskutiert werden sollen.¹³⁾

Obwohl die Tröpfchenbeiträge in der Massenformel möglicherweise beträchtlich grösser sind als diejenigen, die Schaleneffekten der Ordnung A^0 entsprechen, so ist die Auswertung des empirischen Materials an Bindungsenergien im Hinblick auf die Grösse des $A^{1/3}$ - Termes mit gewissen Schwierigkeiten verbunden. Dies liegt vor allem an der Tatsache, dass letzterer eine so langsam variierende stetige Funktion der Teilchenzahl ist, während die Schaleneffekte völlig unstetig von N und Z abhängen.

3 Mikroskopische Theorie

3.1 Zweiteilchenwechselwirkung in Kernmaterie

Die durch die experimentelle Erfahrung wohl begründeten hydrodynamischen Tropfen - bzw. Tröpfchenmodelle des Atomkerns motivieren eine Entwicklung seiner Bindungsenergie nach Potenzen von $A^{1/3}$ (Massenformel). Aufgabe der mikroskopischen Theorien ist es, diese makroskopischen Analogien von der Dynamik der den Kern konstituierenden Nukleonen her im Mittel zu erklären; insbesondere also auch die Entwicklungskoeffizienten der Massenformel richtig zu bestimmen.

Da die charakteristischen Geschwindigkeiten von Nukleonen im Kerninneren in der Grössenordnung von 10 - 20 % der Lichtgeschwindigkeit liegen, scheint es gerechtfertigt zu sein, diese Dynamik mit einer nichtrelativistischen Schrödingergleichung zu beschreiben. Die ihr zugrundeliegende Nukleon - Nukleon - Wechselwirkung V sollte im Idealfall mit dem gesamten kernphysikalischen Erfahrungsmaterial in Einklang stehen, also ausser den Bindungsenergien endlicher Kerne z.B. auch die Streudaten freier Protonen und Neutronen richtig wiedergeben. -

Es ist bisher noch nicht gelungen, eine Wechselwirkung zu finden, die diesen Anforderungen bis an die Grenzen des experimentellen Auflösungsvermögens genügt. Ausgehend von einigen Strukturinvarianzen, die sich aus gewissen Symmetrieüberlegungen ergeben (Hermitezität, Vertauschungsin-

varianz bzgl. der Koordinaten, Translations-, Galilei-, Raum- und Zeitspiegelungsinvarianz, Invarianz gegenüber Drehungen im Orts- und Isospinraum). sind jedoch zahlreiche Ansätze für V gemacht worden, die eine einigermaßen konsistente Behandlung von Kernstruktur- und Streuproblemen ermöglichen. Wichtig ist in diesem Zusammenhang für einen realistischen Ansatz für V, dass das zwischen den Nukleonen wirkende Potential Austauschcharakter hat und in sehr kleinen Teilchenabständen (ca. 0.4 fm) einen harten abstossenden Potentialkern (hard core) besitzt. Diese Eigenschaften folgen nämlich einerseits aus den Ergebnissen der freien Streuung. Andererseits erklären sie das Funktionieren des Tröpfchenmodells: sie führen zur Sättigung, d.h. zur näherungsweise Konstanz der Bindungsenergie pro Teilchen und der zentralen Teilchendichte bei allen grösseren Kernen.

Eine gewisse Schwierigkeit für eine einheitliche Behandlung dieser Probleme besteht darin, dass die Nukleonen im Kern, also in einem Ensemble von Teilchen, die der Fermistatistik genügen, infolge des Pauliprinzips eine gegenseitige "effektive" Wechselwirkung spüren, die von derjenigen in vacuo sehr verschieden ist. Bei Streuprozessen von Nukleonen im Kern verhindert das Pauli-Prinzip, dass diese nach ihrem Zusammenstoß in die bis zur Fermikante von anderen Teilchen besetzten Zwischenzustände gestreut werden. Sie können letztlich (bis auf Vertauschung) nur in ihre alten Zustände zurückkehren. - Die Nukleonen, deren Streuwellen in vacuo

selbst im Unendlichen nicht asymptotisch die Gestalt ebener Wellen annehmen, bewegen sich in Kernmaterie also trotz der starken Wechselwirkung untereinander in einem Abstand, der grösser ist als ca. 1 fm, der "healing distance", wie freie Teilchen. Nur für geringeren Abstand sind ihre Wellenfunktionen infolge des hard core stärker korreliert.

Für Kernstrukturrechnungen stellt sich somit das Problem, die in Kernmaterie zwischen den Nukleonen wirkenden "effektiven Kräfte" auf deren freie Wechselwirkung zurückzuführen.

3.2 Renormierung

Man kann hierbei von der Tatsache ausgehen, dass bei der störungstheoretischen Berechnung der Grundzustandsenergie infolge des hard core unendliche Matrixelemente der freien Nukleon - Nukleon - Wechselwirkung V in der Störungsreihe auftreten. Es wird deshalb versucht, die Reihe bis zur unendlichen Ordnung aufzusummieren.^{57,58)} Da der durchschnittliche gegenseitige Abstand von Nukleonen in Kernmaterie bei etwa 1.7 fm liegt, ist es sehr unwahrscheinlich, dass sich mehr als zwei Teilchen in einem gemeinsamen Volumen aufhalten, dessen Ausdehnung die healing distance unterschreitet.

Man kann sich also beim Aufsummieren der Graphen der Störungsreihe mit denjenigen begnügen, die Prozessen entsprechen, in denen zwei Nukleonen mit Energien unterhalb der Fermikante an einander gestreut werden und dabei entweder über virtuelle Zwischenzustände oberhalb der Fermikante, oder - evtl. miteinander vertauscht - auf direktem Wege wieder in ihre ursprünglichen Zustände zurückkehren.⁺⁾

Unter diesen Voraussetzungen ergibt sich für die potentielle Energie:

⁺⁾ de Shalit und Weisskopf⁵⁹⁾ haben gezeigt, dass Beiträge höherer cluster zur Bindungsenergie pro Teilchen mindestens 0.1 MeV betragen dürften. Nach Preston⁴⁸⁾ sollten sie das Zehnfache dieses Wertes indessen nicht überschreiten.

$$W = \frac{1}{2} \sum_{i < F} U_{ii}, \quad (3.2.1)$$

mit

$$U_{ii'} = \sum_{j < F} (K_{ij,ij} - K_{ij,j'i}), \quad (3.2.2)$$

wobei $K_{ij,1'j'}$ ein Element der Bruecknerschen Reaktionsmatrix^{60,61)} (K - Matrix) darstellt, das durch die Bethe - Goldstone - Gleichung⁶²⁾

$$K_{ij,i'j'} = V_{ij,i'j'} - \sum_{i'',j'' > F} V_{ij,i''j''} (\varepsilon_{i''} + \varepsilon_{j''} - \varepsilon_{i'} - \varepsilon_{j'})^{-1} K_{i''j'',i'j'} \quad (3.2.3)$$

definiert ist. Die in (3.2.2) auftretenden Matrixelemente sind bezüglich einer Basis von Wellenfunktionen gebildet, die sich für $i, i' < F$ (F ist die "Fermigrenze") als Lösung einer Einteilchen - Schrödingergleichung ergeben, die in Matrixschreibweise die Form

$$T_{ii'} + U_{ii'} = \delta_{ii'} \varepsilon_i \quad (3.2.4)$$

besitzt^{63,64)}. Die in (3.2.3) auftretenden "Lochennergien" ε_i ($i < F$) sind hierbei durch die Eigenwerte von (3.2.4) definiert.⁺

Aus Gl. (3.2.1), (3.2.2) und (3.2.4) erkennt man, dass der nach dem Bruecknerschen Verfahren gewonnene Ansatz für die

⁺) Für $i, i' > F$ ("Teilchenzustände") müssen besondere Überlegungen angestellt werden.^{65,66)} Im übrigen ist (3.2.4) auch nicht die einzige mögliche Definition der "Lochennergien" ε_i ⁶⁷⁾ (vgl. z.B. die Bemerkungen über Rearrangement - Energien in 3.6., speziell Gl. (3.6.14)).

Grundzustandsenergie des Atomkernes identisch wird mit seiner Hartree - Fock - Energie (vgl. (3.5.2) und (3.6.9)), wenn man bei deren Berechnung anstelle der freien Wechselwirkung V ein Potential K zwischen den Nukleonen zugrundelegt. Dessen Matricelemente sind - im Gegensatz zu denen von V - von endlicher Grösse und eignen sich darum für Rechnungen in 1. Näherung der Störungstheorie. Offensichtlich hat also K die Bedeutung der effektiven Zweiteilchen - Wechselwirkung im nuklearen Medium. -

Die synchrone Lösung der drei Gleichungen (3.2.2), (3.2.3) und (3.2.4) stellt ein gekoppeltes Selbstkonsistenzproblem dar, dessen numerische Behandlung mit grossen Schwierigkeiten verbunden und von dem Bedarf an Rechenzeit her für grössere Kerne ohne Näherungen im allgemeinen unmöglich ist.

3.3 K - Matrix in Lokaler Dichtenäherung

Um den numerischen Aufwand für die Lösung des gekoppelten Selbstkonsistenzproblems (Brueckner - Hartree - Fock) herabzusetzen, ist man versucht, geeignete Näherungsansätze für die renormierte Wechselwirkung K zu wählen.

Moszkowski und Scott⁷⁰⁾ sowie Brueckner, Gammel und Weitzner⁶⁸⁾ und Bethe⁶⁹⁾ zerlegen das freie Nukleon - Nukleon - Potential V in einen schwachen langreichweitigen und in einen starken kurzreichweitigen Anteil. - Der langreichweitige Anteil, V_1 , kann ohne weiteres in Störungstheorie 1. Ordnung, d.h. in HF - Näherung behandelt werden, während der kurzreichweitige Anteil, V_s , nach dem Bruecknerschen Verfahren renormiert werden sollte.

Dieses Verfahren kann vereinfacht werden, wenn man berücksichtigt, dass die Wellenfunktionen zweier Nukleonen nur innerhalb der "healing distance", also in einer Entfernung von weniger als 1 fm stärker korreliert sind und mit zunehmendem Abstand rasch wieder in ihre ungestörte Form, also in unkorrelierte Einteilchenzustände übergehen. Man erwartet also, dass die Korrelationsstruktur der Wellenfunktion und die korrelationsabhängigen Eigenschaften von K_s , des renormierten V_s , allein von der lokalen Teilchendichte bestimmt werden, sofern diese innerhalb des Bereiches von 1 fm nur schwach variiert (Lokale Dichtenäherung). Ist die Teilchendichte in diesem Bereich näherungsweise konstant,

so können die Einteilchenwellenfunktionen durch ebene Wellen ersetzt werden, so dass die Brueckner - Renormierungsprozedur (3.2.3) von der Lösung des übrigen selbstkonsistenten HF - Problems abgekoppelt werden kann.

In der Kernoberfläche kann die Teilchendichte im Bereich von 1 fm nicht mehr als konstant angesehen werden. Bethe⁶⁹⁾ gab indessen Gründe an, warum auch hier für die Berechnung von K_S in guter Näherung die Einteilchenwellenfunktionen als ebene Wellen angesetzt werden dürfen, die Lokale Dichtenäherung also angewandt werden kann. Er zeigt ausserdem, dass auch die starke langreichweitige effektive Tensorkraft massiv von der Teilchendichte abhängt. Ihre Berücksichtigung ist für den Charakter der Sättigungseigenschaften von K sowie der damit zusammenhängenden Grösse der Teilchendichte im Kerninneren wesentlich.

Leider erweist es sich⁷¹⁾, dass die mit der Lokalen Dichtenäherung gefundene Dichteabhängigkeit der K - Matrix noch ad - hoc - Korrekturen erfahren muss, um unter Zugrundelegen einer realistischen, an Streudaten freier Nukleonen angepassten Wechselwirkung V die korrekte Bindungsenergie pro Teilchen sowie die Teilchendichte in Kernmaterie zu erhalten.

3.4 Phänomenologische Potentiale

Die Notwendigkeit, die aufgrund von mikroskopischen Überlegungen aus einer realistischen Nukleon - Nukleon - Wechselwirkung hergeleitete K - Matrix nachträglich durch Korrekturen für die konkrete Berechnung von Kernmateriedaten geeignet zu machen, legt es nahe, von vorneherein einen phänomenologischen Ansatz mit wenigen freien Parametern für die K - Matrix zu wählen, der gewisse Fundamenteigenschaften von ihr berücksichtigt, ohne einen genauen Zusammenhang mit den Ergebnissen der Nukleon - Nukleon - Streuung in vacuo herzustellen. Man ist dann in der Lage, die freien Potentialparameter an die richtigen Kernmateriedaten anzupassen und mit diesem phänomenologischen Ansatz weitergehende Kernstrukturrechnungen durchzuführen.

Im Gegensatz zu früheren Arbeiten, in denen dichteunabhängige Wechselwirkungen verwendet wurden, die zu wenig sättigen und zu einer zu grossen Kernmittelpunktsdichte führen, bedient man sich in jüngerer Zeit dichteabhängiger Potentiale, um den vom kurzreichweitigen Anteil der freien Nukleon - Nukleon - Wechselwirkung herrührenden Korrelationsanteil der Bruecknerschen K - Matrix zu simulieren. Moszkowski¹⁷⁾, Moszkowski und Ehlers²⁰⁾, Köhler⁷²⁾, Brink und Vautherin⁷³⁾ verwenden einfache dichteabhängige Kontaktwechselwirkungen in der Form der Skyrme⁷⁴⁾ - Wechselwirkung mit großem Erfolg in HF- und TF - Kernstrukturrechnungen.

3.5 Grundzustandsenergie in 1. störungstheoretischer Näherung

Sei

$$\Psi = (A!)^{-1/2} \det |\langle x_k | i \rangle| \quad (3.5.1)$$

das antisymmetrisierte Produkt von A orthonormalen Einteilchenwellenfunktionen $|i\rangle$ in Ortsdarstellung.⁺)

Ist K ein effektives Nukleon - Nukleon - Potential, also etwa die Bruecknersche K - Matrix oder eine der üblichen Approximationen für diese, so kann der mit (3.5.1) gebildete Erwartungswert des Hamiltonoperators $H = T + K$

$$\langle \Psi | H | \Psi \rangle = \sum_{i=1}^A T_{ii} + \frac{1}{2} \sum_{i,j}^A (K_{ij,ij} - K_{ij,ji}) \quad (3.5.2)$$

bei geeigneter Wahl der A Zustände $|i\rangle$ eine gute Näherung für die Grundzustandsenergie des Atomkernes sein. Im Gegensatz zur freien Nukleon - Nukleon - Wechselwirkung enthält nämlich K keine singulären oder sehr stark variierenden Bestandteile, was einen Produktansatz (3.5.1) zur Berechnung der Grundzustandsenergie in erster Näherung der Störungstheorie rechtfertigt.

Enthält K keine Spin- oder Isospinoperatoren, so gilt für die Einteilchenzustände $|i\rangle$ in Ortsdarstellung:

$$\langle x | i \rangle = \varphi_{x_i}(\vec{r}) \begin{vmatrix} \frac{1}{2} m_3 \\ \frac{1}{2} m_4 \end{vmatrix}_i ; \quad (3.5.3)$$

⁺) x steht für Ort-, Spin- und Isospinvariable

die φ_{ϵ_i} sind hierbei Eigenfunktionen einer Einteilchen - Schrödingergleichung. Deren nicht entartete Eigenwerte ϵ_i kennzeichnen Energieschalen für $|1\rangle$, die wegen des Pauli-Prinzips vierfach besetzt werden können. Zu jedem ϵ_i gehören die Zustände

$$\varphi_{\epsilon_i}(\vec{r}) \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle_i \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle_i, \varphi_{\epsilon_i}(\vec{r}) \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle_i \left| \frac{1}{2} -\frac{1}{2} \right\rangle_i, \quad (3.5.4)$$

sowie bei Annahme von Zeitumkehrinvarianz die "zeitumgekehrten"

$$\varphi_{\epsilon_i}^*(\vec{r}) \left| \frac{1}{2} -\frac{1}{2} \right\rangle_i \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle_i, \varphi_{\epsilon_i}^*(\vec{r}) \left| \frac{1}{2} -\frac{1}{2} \right\rangle_i \left| \frac{1}{2} -\frac{1}{2} \right\rangle_i. \quad (3.5.5)$$

Sind alle Energieschalen bis zur Fermienergie ϵ_F vollständig aufgefüllt, so ist (3.5.2) offensichtlich invariant gegenüber Drehungen im Spin- und Isospinraum.

Zur Auswertung der den Spin- und Isospinvariablen entsprechenden Anteile von (3.5.2) zerlegen wir K in

$$K = \sum_{S,T} K_{ST} P_S P_T, \quad (3.5.6)$$

mit

$$P_S = \sum_{M_S} |S M_S\rangle \langle S M_S|, \quad (3.5.7)$$

$$P_T = \sum_{M_T} |T M_T\rangle \langle T M_T|. \quad (3.5.8)$$

P_S ist für $S = 0$ bzw. $S = 1$ der Projektionsoperator auf das Spin- Singulett $|S = 0, M_S = 0\rangle$, bzw. auf die Triplets $|S = 1, M_S = -1\rangle, |S = 1, M_S = 0\rangle, |S = 1, M_S = +1\rangle$ des Zweinukleonensystems; P_T wird für den Isospin analog definiert.

Führt man die Berechnung der in (3.5.2) auftretenden K - Matrix - Elemente im Ortsraum aus, so ergibt sich mit dem Ansatz (3.5.4) und (3.5.5):

$$K_{ij,ij} = \sum_{S,T} \int d^3r_1 d^3r_2 d^3r_1' d^3r_2' \varphi_{\epsilon_i}^*(\vec{r}_1) \varphi_{\epsilon_j}^*(\vec{r}_2) \langle \vec{r}_1 \vec{r}_2 | K_{ST} | \vec{r}_1' \vec{r}_2' \rangle \cdot \\ \varphi_{\epsilon_i}(\vec{r}_1') \varphi_{\epsilon_j}(\vec{r}_2') C_{dir}(S, m_{s i}, m_{s j}) C_{dir}(T, m_{t i}, m_{t j}), \quad (3.5.9)$$

$$K_{ij,ji} = \sum_{S,T} \int d^3r_1 d^3r_2 d^3r_1' d^3r_2' \varphi_{\epsilon_i}^*(\vec{r}_1) \varphi_{\epsilon_j}^*(\vec{r}_2) \langle \vec{r}_1 \vec{r}_2 | K_{ST} | \vec{r}_2' \vec{r}_1' \rangle \cdot \\ \varphi_{\epsilon_i}(\vec{r}_1') \varphi_{\epsilon_j}(\vec{r}_2') C_{exch}(S, m_{s i}, m_{s j}) C_{exch}(T, m_{t i}, m_{t j}), \quad (3.5.10)$$

wobei

$$C_{dir}(S, m_{s i}, m_{s j}) = \sum_{M_S} \langle \frac{1}{2} \frac{1}{2} m_{s i} m_{s j} | S M_S \rangle \langle S M_S | \frac{1}{2} \frac{1}{2} m_{s i} m_{s j} \rangle, \quad (3.5.11)$$

$$C_{exch}(S, m_{s i}, m_{s j}) = \sum_{M_S} \langle \frac{1}{2} \frac{1}{2} m_{s i} m_{s j} | S M_S \rangle \langle S M_S | \frac{1}{2} \frac{1}{2} m_{s j} m_{s i} \rangle. \quad (3.5.12)$$

$C_{dir}(T, m_{t i}, m_{t j})$ und $C_{exch}(T, m_{t i}, m_{t j})$ sind entsprechend definiert. Wertet man die in (3.5.11) und (3.5.12) auftretenden Clebsch - Gordon - Koeffizienten aus, so ergibt sich bei

$m_{s i}$ und $m_{s j}$

$$\sum_{m_{s i}, m_{s j}} C_{dir}(S, m_{s i}, m_{s j}) = 2S + 1, \quad (3.5.13)$$

$$\sum_{m_{0i}, m_{0j}} C_{\text{exch}}(S, m_{0i}, m_{0j}) = (-1)^{S+1} (2S+1). \quad (3.5.14)$$

Entsprechende Relationen gelten für den Isospin. -

φ_{ε_i} und $\varphi_{\varepsilon_i}^*$ unterscheiden sich höchstens um einen konstanten Phasenfaktor mit dem Betrag 1. Es gilt deshalb:

$$\begin{aligned} \langle \Psi | H | \Psi \rangle &= \int d^3 + 4 \sum_{\varepsilon_i} \varphi_{\varepsilon_i}^*(\vec{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}_r^2 \right) \varphi_{\varepsilon_i}(\vec{r}) \Theta(\varepsilon_F - \varepsilon_i) + \\ &\quad \frac{1}{2} \int d^3 r_1 d^3 r_2 d^3 r_1' d^3 r_2' \sum_{S,T} (2S+1) (2T+1) \cdot \\ &\quad \sum_{\varepsilon_i, \varepsilon_j} \varphi_{\varepsilon_i}^*(\vec{r}_1) \varphi_{\varepsilon_j}^*(\vec{r}_2) \left[\langle \vec{r}_1 \vec{r}_2 | V_{ST} | \vec{r}_1' \vec{r}_2' \rangle - \right. \\ &\quad \left. (-1)^{S+T} \langle \vec{r}_1 \vec{r}_2 | V_{ST} | \vec{r}_2' \vec{r}_1' \rangle \right] \varphi_{\varepsilon_i}(\vec{r}_1') \varphi_{\varepsilon_j}(\vec{r}_2') \Theta(\varepsilon_F - \varepsilon_i) \cdot \\ &\quad \Theta(\varepsilon_F - \varepsilon_j). \end{aligned} \quad (3.5.15)$$

Offensichtlich ist $\langle \Psi | H | \Psi \rangle$ ein Funktional der Einteilchen-dichtematrix

$$n(\vec{r}, \vec{r}') = 4 \sum_{\varepsilon_i} \varphi_{\varepsilon_i}^*(\vec{r}') \varphi_{\varepsilon_i}(\vec{r}) \Theta(\varepsilon_F - \varepsilon_i). \quad (3.5.16)$$

Es ergibt sich

$$\begin{aligned} \langle \Psi | H | \Psi \rangle &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int d^3 r \vec{\nabla}_r^2 n(\vec{r}, \vec{r}) \Big|_{\vec{r}'=\vec{r}} + \frac{1}{32} \int d^3 r_1 d^3 r_2 d^3 r_1' d^3 r_2' \cdot \\ &\quad \sum_{S,T} (2S+1) (2T+1) \left[\langle \vec{r}_1 \vec{r}_2 | V_{ST} | \vec{r}_1' \vec{r}_2' \rangle - \right. \\ &\quad \left. (-1)^{S+T} \langle \vec{r}_1 \vec{r}_2 | V_{ST} | \vec{r}_2' \vec{r}_1' \rangle \right] n(\vec{r}_1' \vec{r}_2') n(\vec{r}_2' \vec{r}_1'). \end{aligned} \quad (3.5.17)$$

Aus der Orthonormalität der $|i\rangle$ folgen für die Dichtematrix die zwei Beziehungen

$$\int d^3r \, n(\vec{r}', \vec{r}) \, n(\vec{r}, \vec{r}'') = 4 \, n(\vec{r}', \vec{r}''), \quad (3.5.18)$$

und

$$\int d^3r \, n(\vec{r}, \vec{r}) = A. \quad (3.5.19)$$

Es ist

$$n(\vec{r}, \vec{r}') = n(\vec{r}', \vec{r}). \quad (3.5.20)$$

Wir bezeichnen

$$n(\vec{r}) := n(\vec{r}, \vec{r}) \quad (3.5.21)$$

als Teilchendichte des Kernes.

3.6 Hartree - Fock - Theorie mit dichteabhängigen Potentialen

Abgesehen von der prinzipiellen Gültigkeit eines Einteilchenansatzes (3.5.1) für die Berechnung der Grundzustandsenergie eines Systems von A Nukleonen nach (3.5.2), hängt die Güte dieser Näherung, wie in 3.5 erwähnt, wesentlich von der Natur der Wellenfunktionen $|i\rangle$ ab.

Während man in Thomas- Fermi - Theorie diese in geeigneter Weise durch ebene Wellen approximiert, sucht man in Hartree - Fock - Theorie diejenige Schrödingergleichung, deren Lösungen das Funktional (3.5.2) minimalisieren. In

$$\delta \langle \Psi | H | \Psi \rangle = 0 \quad (3.6.1)$$

sollen dabei nur Variationen $|\delta i\rangle$ der $|i\rangle$ (bzw. $\langle \delta i|$ der $\langle i|$) erlaubt sein, die die Orthonormierung der Zustände erhalten.

Unter Einbeziehung dieser Nebenbedingungen ergibt sich dann folgendes Variationsprinzip :

$$\delta \left[\langle \Psi | H | \Psi \rangle - \sum_{i,j} \varepsilon_{ij} \langle i | j \rangle \right] = 0. \quad (3.6.2)$$

Die Lagrangeschen Multiplikatoren ε_{ij} gewährleisten die Orthonormalität der $|i\rangle$.

Sehen wir zunächst die K - Matrix als von Wellenfunktionen unabhängig an.

$\langle \Psi | H | \Psi \rangle$ und damit $\delta \langle \Psi | H | \Psi \rangle$ sind reell; hieraus ergibt sich durch Subtraktion der zu (3.6.2) konjugiert komplexen Gleichung von (3.6.2) die Hermitezität der $A \times A$ - Matrix $\varepsilon = ((\varepsilon_{ij}))$.

Sei D diejenige Matrix, die ε diagonalisiert:

$$\delta_{ij} \tilde{\varepsilon}_i = (D^{-1} \varepsilon D)_{ij} ; \quad D^\dagger = D^{-1}. \quad (3.6.3)$$

Wir gehen durch

$$|\tilde{i}\rangle = \sum_j |j\rangle D_{ji} \quad (3.6.4)$$

zu einem anderen Satz $|\tilde{i}\rangle$ von Wellenfunktionen über.

Bildet man mit diesen $|\tilde{i}\rangle$ den Produktansatz $|\tilde{\Psi}\rangle$ gemäss (3.5.1), so besteht folgender Zusammenhang zwischen $|\tilde{\Psi}\rangle$ und $|\Psi\rangle$:

$$|\tilde{\Psi}\rangle = |\Psi\rangle \det(D). \quad (3.6.5)$$

Wegen

$$|\det(D)| = 1 \quad (3.6.6)$$

ist

$$\langle \tilde{\Psi} | H | \tilde{\Psi} \rangle = \langle \Psi | H | \Psi \rangle, \quad (3.6.7)$$

und aus (3.6.2) folgt dann

$$\delta [\langle \tilde{\Psi} | H | \tilde{\Psi} \rangle - \sum_i \tilde{\varepsilon}_i \langle \tilde{i} | \tilde{i} \rangle] = 0. \quad (3.6.8)$$

Bezüglich der rechten Seite von (3.5.2) sind wegen (3.6.7) die Sätze $|i\rangle$ und $|\tilde{i}\rangle$ physikalisch äquivalent; wir können uns also auf die Lösung des Variationsproblems (3.6.8) beschränken. In Zukunft lassen wir die Tilde $\sim$

wieder fort. - Man kann leicht zeigen, dass die Variationen $|\delta i\rangle$ und $\langle \delta i|$ als von einander unabhängig angesehen werden dürfen. Da H hermitesch ist, führt Gl. (3.6.8) zu einem System von sog. Hartree - Fock - Gleichungen, aus denen sich diejenigen $|i\rangle$ berechnen lassen, die zu dem im Rahmen des Produktansatzes (3.5.1) niedrigsten Erwartungswert von H führen. Aus (3.6.8) folgen nämlich A gekoppelte Schrödinger - Einteilchengleichungen für den Satz $\{|i\rangle, i = 1 \dots A\}$.

In Matrixschreibweise lauten diese:

$$T_{ii} + \sum_j (K_{ij,ij} - K_{ij,ji}) = \delta_{ii} \varepsilon_i, \quad (3.6.9)$$

(vgl. (3.2.4) und (3.2.2)).

Nach (3.5.2) ergibt sich dann

$$\langle \Psi | H | \Psi \rangle = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^A (\varepsilon_i + T_{ii}). \quad (3.6.10)$$

Ist K die Brueckner - Matrix, so stellt (3.5.2) die Brueckner - Hartree - Fock - Grundzustandsenergie, (3.6.9) das BHF - Gleichungssystem für die Lochzustände und -energien dar.

Gl. (3.6.9) lautet in Ortsraumdarstellung:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\vec{r}_i}^2 \varphi_{\varepsilon_i}(\vec{r}_i) + \int d^3\vec{r}_1' U(\vec{r}_i, \vec{r}_1') \varphi_{\varepsilon_i}(\vec{r}_1') = \varepsilon_i \varphi_{\varepsilon_i}(\vec{r}_i), \quad (3.6.11)$$

mit

$$U(\vec{r}_1, \vec{r}_1') = \frac{1}{16} \int d^3\vec{r}_2 d^3\vec{r}_2' \sum_{S,T} (2S+1)(2T+1) [\langle \vec{r}_1, \vec{r}_2 | K_{ST} | \vec{r}_1', \vec{r}_2' \rangle - (-1)^{S+T} \langle \vec{r}_1, \vec{r}_2 | K_{ST} | \vec{r}_2', \vec{r}_1' \rangle] u(\vec{r}_2', \vec{r}_2). \quad (3.6.12)$$

Wir haben bei der Ableitung von (3.6.9) nicht berücksichtigt, dass K selbst von den Wellenfunktionen abhängen kann (vgl. (3.2.3)). In der Lokalen Dichtenäherung für die Brueckner-sche K - Matrix z.B. hängt K explizit von der Teilchendichte $n(\vec{r})$ ab, die ihrerseits nach (3.5.16) ein Funktional der Wellenfunktionen ist.

Brueckner und Goldmann⁷⁵⁾ wählen für die Dichteabhängigkeit von K den Ansatz

$$\langle \vec{r}_1 \vec{r}_2 | K [n (\frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2 + \vec{r}_1' + \vec{r}_2'}{4})] | \vec{r}_1' \vec{r}_2' \rangle . \quad (3.6.13)$$

Die Variation der Wellenfunktionen nach Gl. (3.6.8) führt dann offensichtlich zu Zusatztermen in (3.6.9). Wir erhalten:

$$T_{ii'} + \sum_j (K_{ij, ij} - K_{ij, ji}) + U_{ii'}^R = \delta_{ii'} \varepsilon_i . \quad (3.6.14)$$

U^R wird im Ortsraum dargestellt durch

$$U^R(\vec{r}) = \frac{1}{32} \int d^3r_1 d^3r_2 d^3r_1' d^3r_2' \sum_{S,T} (2S+1)(2T+1) \left[\langle \vec{r}_1 \vec{r}_2 | \frac{\partial K_{ST}}{\partial n} | \vec{r}_1' \vec{r}_2' \rangle - (-1)^{S+T} \langle \vec{r}_1 \vec{r}_2 | \frac{\partial K_{ST}}{\partial n} | \vec{r}_2' \vec{r}_1' \rangle \right] n(\vec{r}_1, \vec{r}_1) n(\vec{r}_2, \vec{r}_2) \delta \left(\frac{1}{4} (\vec{r}_1 + \vec{r}_2 - \vec{r}_1' - \vec{r}_2') - \vec{r} \right) . \quad (3.6.15)$$

Es ist dann

$$\langle \Psi | H | \Psi \rangle = \frac{1}{2} \sum_i \{ \varepsilon_i + T_{ii} \} + E^R , \quad (3.6.16)$$

mit

$$E^R = -\frac{1}{2} \sum_i U_{ii}^R . \quad (3.6.17)$$

E^R bezeichnet man als Rearrangement - Energie. Eine ausführliche Diskussion der hiermit zusammenhängenden Fragen findet man bei G. Ripka⁷⁶⁾.

Für die Berücksichtigung der Dichteabhängigkeit der K-Matrix bei der Variation spricht, dass dann das Theorem von Hugenholtz und van Hove⁷⁷⁾ erfüllt ist, nach dem in Kernmaterie die Energie eines Teilchens an der Fermi-Fläche gleich der mittleren Energie aller Teilchen im System sein muss. Ausserdem erzielt man bei Kernstrukturrechnungen mit Rearrangement - Energie^{78,79)}

Ergebnisse, die mit dem Experiment besser übereinstimmen.

Prinzipielle Einwände gegen ein Mitvariieren von K in (3.6.2) wurden von Eden⁶³⁾ u.a. geltend gemacht.-

In 3.1 wurde die Galileiinvarianz der freien Nukleon - Nukleon - Wechselwirkung gefordert. Für die K - Matrix bedeutet dies, dass die Wigner - Transformierte

$$K_W(\vec{r}_1, \vec{r}_1', \vec{p}_1, \vec{p}_1') = \int d\vec{r}_2' d\vec{r}_2 e^{-i\vec{p}_1(\vec{r}_1 - \vec{r}_1')} e^{-i\vec{p}_2(\vec{r}_2 - \vec{r}_2')} \langle \vec{r}_1, \vec{r}_2 | K | \vec{r}_1', \vec{r}_2' \rangle \quad (3.6.18)$$

des Matricelements $\langle \vec{r}_1, \vec{r}_2 | K | \vec{r}_1', \vec{r}_2' \rangle$ nur vom Relativimpuls $\vec{p}_1 - \vec{p}_2$ der Teilchen abhängt. Es ist dann leicht zu zeigen, dass

$$\langle \vec{r}_1, \vec{r}_2 | K | \vec{r}_1', \vec{r}_2' \rangle = \delta(\vec{R} - \vec{R}') K(\vec{R}, \vec{r}, \vec{r}') \quad (3.6.19)$$

wobei

$$\vec{R} = \frac{1}{2} (\vec{r}_1 + \vec{r}_2), \quad \vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2. \quad (3.6.20)$$

Im Gegensatz zur freien Nukleon - Nukleon - Wechselwirkung V ist jedoch die effektive K - Matrix sicher für endliche Kerne nicht mehr invariant gegenüber Translationen, da sie von der Dichte des umgebenden nuklearen Mediums abhängig ist.

Mit dem Ansatz von Brueckner und Goldmann⁷⁵⁾ (vgl. (3.6.13)) ergibt sich :

$$\langle \vec{r}_1, \vec{r}_2 | K | \vec{r}_1', \vec{r}_2' \rangle = \delta(\vec{R} - \vec{R}') \langle \vec{r} | K[u(\vec{R})] | \vec{r}' \rangle. \quad (3.6.21)$$

Die Gesamtenergie E ist dann nach (3.5.17):

$$E = \int d^3r \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}_r^2 \right) u(\vec{r}, \vec{r}) \Big|_{\vec{r}=\vec{r}'} + \frac{1}{32} \int d^3R d^3r d^3r' \sum_{S,T} (2S+1)(2T+1) \cdot \\ \left[\langle \vec{r} | K_{ST}[u(\vec{R})] | \vec{r}' \rangle - (-1)^{S+T} \langle \vec{r} | K_{ST}[u(\vec{R})] | -\vec{r}' \rangle \right] \cdot \\ u\left(\vec{R} + \frac{\vec{r}}{2}, \vec{R} + \frac{\vec{r}'}{2}\right) u\left(\vec{R} - \frac{\vec{r}}{2}, \vec{R} - \frac{\vec{r}'}{2}\right). \quad (3.6.22)$$

Wir gehen nochmals zu Schwerpunkts- und Relativkoordinaten über und definieren:

$$\tilde{u}\left(\frac{\vec{r}+\vec{r}'}{2}, \vec{r}-\vec{r}'\right) := u(\vec{r}, \vec{r}'), \quad (3.6.23)$$

$$\tilde{K}_{ST}[u(\vec{R}), \frac{\vec{r}+\vec{r}'}{2}, \vec{r}-\vec{r}'] := \langle \vec{r} | K_{ST}[u(\vec{R})] | \vec{r}' \rangle. \quad (3.6.24)$$

Durch die Substitution

$$\vec{r} = \vec{R} + \frac{1}{4}(\vec{r}+\vec{r}'), \quad \vec{r}' = \vec{R} - \frac{1}{4}(\vec{r}+\vec{r}'), \quad (3.6.25)$$

$$\vec{\xi} = \frac{1}{2}(\vec{r}-\vec{r}'), \quad (3.6.26)$$

erhalten wir für E schliesslich

$$E = \int d^3r \eta(\vec{r}), \quad (3.6.27)$$

mit der Energiedichte

$$\eta(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}_r^2 n(\vec{r}, \vec{r}) \Big|_{\vec{r}'=\vec{r}} + \frac{1}{2} \int d^3r' d^3\xi \cdot \\ \hat{K} \left[n\left(\frac{\vec{r}+\vec{r}'}{2}\right), \vec{r}-\vec{r}', 2\vec{\xi} \right] \hat{n}(\vec{r}', \vec{\xi}) \hat{n}(\vec{r}, -\vec{\xi}), \quad (3.6.28)$$

wobei

$$\hat{K} \left[n\left(\frac{\vec{r}+\vec{r}'}{2}\right), \vec{r}-\vec{r}', 2\vec{\xi} \right] = \frac{1}{2} \sum_{S,T} (2S+1)(2T+1) \left\{ \tilde{K}_{ST} \left[n\left(\frac{\vec{r}+\vec{r}'}{2}\right), \vec{r}-\vec{r}', 2\vec{\xi} \right] - \right. \\ \left. (-1)^{S+T} \tilde{K}_{ST} \left[n\left(\frac{\vec{r}+\vec{r}'}{2}\right), \vec{\xi}, 2(\vec{r}-\vec{r}') \right] \right\}. \quad (3.6.29)$$

Wir haben in (3.6.28) und (3.6.29) $\hat{n}$ durch $\vec{r}$ und $\hat{n}'$ durch $\vec{r}'$ ersetzt. Sei

$$\tilde{U}(\vec{r}, \vec{\xi}) = \int d^3r' \hat{K} \left[n\left(\frac{\vec{r}+\vec{r}'}{2}\right), \vec{r}-\vec{r}', 2\vec{\xi} \right] \hat{n}(\vec{r}', \vec{\xi}). \quad (3.6.30)$$

Dann wird aus (3.6.28) :

$$\eta(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}_r^2 n(\vec{r}, \vec{r}) \Big|_{\vec{r}'=\vec{r}} + \frac{1}{2} \int d^3\xi \tilde{U}(\vec{r}, \vec{\xi}) \hat{n}(\vec{r}, -\vec{\xi}). \quad (3.6.31)$$

Aus der Hartree - Fock - Gleichung (3.6.11) wird dann :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}_r^2 \varphi_{E_i}(\vec{r}) + \int d^3\xi \tilde{U}(\vec{r}-\frac{\vec{\xi}}{2}, \vec{\xi}) \varphi_{E_i}(\vec{r}-\frac{\vec{\xi}}{2}) + \\ U^R(\vec{r}) \varphi_{E_i}(\vec{r}) = E_i \varphi_{E_i}(\vec{r}), \quad (3.6.32)$$

wobei

$$U^R(\vec{r}) = \int d^3r' d^3\xi \frac{\partial \hat{K} \left[n(\vec{r}, 2(\vec{r}-\vec{r}'), 2\vec{\xi}) \right]}{\partial n(\vec{r})} \tilde{n}(\vec{r}', \vec{\xi}) \cdot \quad (3.6.33) \\ \tilde{n}(2\vec{r}-\vec{r}', -\vec{\xi}).$$

4 Massenformel unter mikroskopischen Gesichtspunkten

4.1 Vorbemerkung

Es soll die Grundzustandsenergie E_A grosser Kerne mit A Nukleonen nach Potenzen von $A^{1/3}$

$$E_A = \alpha_c A + \beta_c A^{2/3} + \gamma_c A^{1/3} \dots \quad (4.1.1)$$

entwickelt werden. Hierbei können wir voraussetzen, dass die zwischen den Nukleonen wirkenden Kräfte Sättigungscharakter besitzen, also zu einem homogenen Kerninneren mit näherungsweise konstanter Teilchendichte führen, die am Rande in einem Bereich, der sehr viel kleiner ist als die Gesamtausdehnung des Kernes, exponentiell von 90 % auf 10 % ihres Innenwertes abfällt.

Wie schon in 2.1 erwähnt, machen sich jedoch im Kerninneren geringfügige Dichtefluktuationen bemerkbar, die von einigen Autoren in Hartree - Fock - Rechnungen bestätigt, aber in ihrer Amplitude meistens stark überschätzt werden.^{50,71)}

Thouless und Thorpe¹¹⁵⁾ untersuchen diese Inhomogenitäten und teilen sie ein in solche nahe dem Kernzentrum und solche nahe der Kernoberfläche. Diejenigen nahe dem Zentrum zeigen ein von Kern zu Kern total unstetiges Verhalten: sie entsprechen Schaleneffekten, die nach Süßmann^{55,56)} und Swiatecki⁵³⁾ in einer Entwicklung (4.1.1) der Grundzustandsenergie keinen $A^{1/3}$ - Beitrag liefern.

Die Dichteschwankungen nahe der Oberfläche klingen im Abstand s von dieser in Richtung Kerninneres wie

$$\frac{\sin(k_F s)}{(k_F s)^2} \quad (4.1.2)$$

ab. k_F ist hierbei der Fermiimpuls.

Es ist offensichtlich, dass mit fluktuierenden Teilchendichten Schwankungen der Energiedichte verbunden sind.

S. Knaak³³⁾ hat gezeigt, dass diese das gleiche asymptotische Abklingverhalten in Richtung Kerninneres aufweisen, wie diejenigen der Teilchendichte.

Es scheint also berechtigt zu sein, in einer Entwicklung (4.1.1) von E_A nach Potenzen von $A^{1/3}$ für Energie- und Teilchendichten grosser Kerne in einem Abstand von der Kernoberfläche, in denen die Oszillationen (4.1.2) hinreichend abgeklungen sind, ihre über Schaleneffekte gemittelten Werte anzusetzen.

4.2 Massenformel des Tropfenmodells

Um die folgenden Gleichungen übersichtlicher zu gestalten, sollen alle in ihnen auftretenden Grössen, die von der Teilchenzahl abhängen, mit einem tiefgestellten Index A bezeichnet werden.

Sei η_A die Energiedichte, n_A die Teilchendichte eines sehr grossen sphärischen Kernes, η_{A_0} und η_{A_0} deren über Schaleneneffekte gemittelten Werte im Kerninneren.

Dann ist

$$E_A = \int d^3r \eta_A(\vec{r}), \quad (4.2.1)$$

und

$$A = \int d^3r n_A(\vec{r}). \quad (4.2.2)$$

Für eine Entwicklung

$$E_A = \alpha_c A + \beta_c A^{2/3} + \gamma_c A^{1/3} \dots \quad (4.2.3)$$

(α_c , β_c , γ_c seien von A unabhängig) lassen wir im folgenden die Coulombenergie ausser Betracht und setzen

$$N = Z. \quad (4.2.4)$$

Wir können nun E_A durch

$$E_A = E_{A \text{ vol}} + E_{A \text{ surf}}, \quad (4.2.5)$$

mit

$$E_{A \text{ vol}} = \frac{\eta_{A_0}}{n_{A_0}} \int d^3r n_A(\vec{r}), \quad (4.2.6)$$

und

$$E_{A \text{ surf}} = \int d^3r \left[\eta_A(r) - \frac{\eta_{A0}}{n_{A0}} \eta_A(r) \right], \quad (4.2.7)$$

in einen Volumenenergie- und einen Oberflächenenergieanteil zerlegen. $E_{A \text{ vol}}$ hat nämlich seinen Ursprung weitgehend im Volumbereich des Kernes, während sich $E_{A \text{ surf}}$ aus dem Oberflächenbereich herleitet: der Integrand von (4.2.7) ist nur dort von Null verschieden; im homogenen Inneren verschwindet er. Wegen der sphärischen Symmetrie des Kernes sind Energie- und Teilchendichte Funktionen des Abstandes r vom Kernmittelpunkt: $\eta_A = \eta_A(r)$, $n_A = n_A(r)$. Wir gehen darum für die folgenden Rechnungen auf sphärische Polarkoordinaten über.

Es wird sich als zweckmässig für die Entwicklung der Grundzustandsenergie nach Potenzen von $A^{1/3}$ erweisen, einen Kernradius R und damit die Lage einer Kernoberfläche zu definieren. Wir legen als "mittleres R " den Radius R_A derjenigen Kugel fest, die bei homogener, am Rande scharf abfallender Dichteverteilung $n_{A0} \Theta(R_A - r)$ gerade A Nukleonen enthält. Es gilt dann:

$$A = 4\pi \int dr r^2 n_A(r) = 4\pi \int dr r^2 n_{A0} \Theta(R_A - r), \quad (4.2.8)$$

also

$$\int dr r^2 [\eta_A(r) - n_{A0} \Theta(R_A - r)] = 0. \quad (4.2.9)$$

Aus (4.2.9) ergibt sich

$$\frac{4\pi}{3} n_{A0} R_A^3 = A, \quad (4.2.10)$$

oder

$$R_A = r_A A^{1/3}, \quad (4.2.11)$$

mit

$$r_A = \left[\frac{3}{4\pi n_{A0}} \right]^{1/3}. \quad (4.2.12)$$

Der Oberflächenenergieanteil $E_{A \text{ surf}}$ ist offensichtlich der Grösse der Kernoberfläche, d.h. $4\pi R_A^2$ ungefähr proportional:

$$E_{A \text{ surf}} = 4\pi R_A^2 \sigma_A, \quad (4.2.13)$$

wobei

$$\sigma_A = \frac{1}{R_A^2} \int_0^\infty dr r^2 [\eta_A(r) - e_A n_A(r)], \quad (4.2.14)$$

mit

$$e_A = \frac{\eta_{A0}}{n_{A0}}, \quad (4.2.15)$$

die Oberflächenspannung darstellt. Wegen (4.2.11) ist die Grösse der Kernoberfläche, $4\pi R_A^2$, näherungsweise proportional zu $A^{2/3}$:

$$4\pi R_A^2 = 4\pi r_A^2 A^{2/3}. \quad (4.2.16)$$

Aus $E_{A \text{ surf}}$ wird

$$E_{A \text{ surf}} = 4\pi r_A^2 \sigma_A A^{2/3}. \quad (4.2.17)$$

Für die Gesamtenergie erhält man

$$E_A = E_{A \text{ vol}} + E_{A \text{ surf}} = e_A A + 4\pi r_A^2 \sigma_A A^{2/3}. \quad (4.2.18)$$

Gl. (4.2.18) ist der erste Schritt in Richtung einer Entwicklung der Grundzustandsenergie E_A nach Potenzen von $A^{1/3}$ gemäss (4.2.3). Sieht man die Koeffizienten der Massenformel (4.2.18) als teilchenzahlunabhängig an, so entspricht diese Näherung gerade dem Tropfenmodell des Atomkernes, das Terme der Ordnung $A^{1/3}$ vernachlässigt.

4.3 Massenformel des Tröpfchenmodells

Die Verfeinerung des Tropfen - zum Tröpfchenmodell ist damit verbunden, dass die A - Abhängigkeit der Koeffizienten e_A und $r_A^2 \sigma_A$ bis zur Ordnung $A^{1/3}$ in der Grundzustandsenergie mit berücksichtigt wird. Dies führt zu einer Massenformel wie Gl. (4.2.3) mit teilchenzahlunabhängigen Koeffizienten $\alpha_c, \beta_c, \gamma_c$.

In (4.2.18) muss dazu

$$\begin{aligned} e_A & \text{ mindestens bis zur zweiten Ordnung in } A^{-1/3} \\ r_A^2 \text{ und } \sigma_A & \text{ mindestens bis zur ersten Ordnung in } A^{-1/3} \end{aligned}$$

entwickelt werden.

Unter Vernachlässigung von unstetig mit der Teilchenzahl variierenden Schaleneffekten wollen wir annehmen, dass alle im folgenden auftretenden Funktionen f_A von A beliebig oft nach $A^{-1/3}$ differenzierbar sind. Falls f_A für $A \rightarrow \infty$ beschränkt bleibt, ist

$$f_A = f_\infty + f'_\infty A^{-1/3} + \frac{1}{2} f''_\infty A^{-2/3} \dots \quad (4.3.1)$$

mit

$$f_\infty = f_A \Big|_{A \rightarrow \infty} \quad (4.3.2)$$

$$f'_\infty = \frac{\partial f_A}{\partial (A^{-1/3})} \Big|_{A \rightarrow \infty} \quad (4.3.3)$$

$$f''_\infty = \frac{\partial^2 f_A}{\partial (A^{-1/3})^2} \Big|_{A \rightarrow \infty} \quad (4.3.4)$$

eine Entwicklung von f_A nach Potenzen von $A^{-1/3}$ um den "semiinfiniten Fall": Lässt man nämlich die Teilchenzahl A über alle Grenzen wachsen, so wird für diejenigen Überlegungen, in denen nur ein (durch die endliche Reichweite der Nukleon - Nukleon - Wechselwirkung) beschränkter Raumbereich eine Rolle spielt,

- 1) das Innere des Kernes als homogen mit Nukleonen erfüllt und unendlich in den "linken" Halbraum ausgedehnt;
- 2) die Kernoberfläche als ebene Grenzfläche zum leeren "rechten" Halbraum

angesehen werden dürfen. Dies ist das Modell der semiinfiniten Kernmaterie.³⁾ f_∞ bezeichnet man darum als den semiinfiniten Wert von f_A .

Wegen der Sättigungseigenschaften der Kernkräfte bleiben die Größen η_A , e_A , r_A beim Grenzübergang $A \rightarrow \infty$ beschränkt. Dies gilt auch für σ_A . In (4.2.14) ist der Integrand nur im Oberflächenbereich, also für $r - R_A \ll R_A$ wesentlich von Null verschieden. Wir definieren deshalb:

$$s = r - R_A \quad (4.3.5)$$

Sei

$$\eta_A(s) = \begin{cases} \eta_A(r) & \text{für } -R_A \leq s < \infty \\ \eta_A(0) & \text{für } s < -R_A \end{cases} \quad (4.3.6)$$

und

$$\eta_A(s) = \begin{cases} \eta_A(r) & \text{für } -R_A \leq s < \infty \\ \eta_A(0) & \text{für } s < -R_A \end{cases} \quad (4.3.7)$$

das radiale Energiedichte bzw. Teilchendichteprofil. Dann beschränkt sich die Integrationskoordinate s in

$$\sigma_A = \int_{-\infty}^{+\infty} ds \left[1 + \frac{2s}{R_A} + \frac{s^2}{R_A^2} \right] [\hat{\eta}_A(s) - e_A \hat{\eta}_A(s)] \quad (4.3.8)$$

auf Werte, die klein gegen R_A sind und in der Grenze $A \rightarrow \infty$ endlich bleiben. Die Oberflächenenergiedichte $[\hat{\eta}_A(s) - e_A \hat{\eta}_A(s)]$ hat nämlich für $A \rightarrow \infty$ nach S. Knaak³³⁾ das asymptotische Verhalten (4.1.2).

Es ist dann

$$\sigma_\infty = \int_{-\infty}^{+\infty} ds [\hat{\eta}_\infty(s) - e_\infty \hat{\eta}_\infty(s)] < \infty, \quad (4.3.9)$$

wobei $\hat{\eta}_\infty(s)$ und $\hat{n}_\infty(s)$ die semiinfiniten Energie- und Teilchendichteprofile darstellen.

Aus Gl. (4.2.9), die wir durch R_A dividieren:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} ds \left[1 + \frac{2s}{R_A} + \frac{s^2}{R_A^2} \right] [\hat{\eta}_A(s) - n_{A0} \Theta(-s)] = 0, \quad (4.3.10)$$

gewinnen wir durch den Grenzübergang $A \rightarrow \infty$, also $R_A \rightarrow \infty$, die Bedingungsgleichung

$$\int_{-\infty}^{+\infty} ds [\hat{\eta}_\infty(s) - n_{\infty 0} \Theta(-s)] = 0 \quad (4.3.11)$$

für die Zählung der Koordinate s der semiinfiniten Energie- und Teilchendichteprofile.

Es sollen nun Entwicklungen von e_A , r_A^2 und σ_A um ihre semiinfiniten Werte (vgl. (4.3.1)) angestellt werden.

Im Kerninneren hängt die Energiedichte: η_{A_0} allein von n_{A_0} ab. Dann ist

$$e_A = \frac{\eta_{A_0}}{n_{A_0}} = e[n_{A_0}]. \quad (4.3.12)$$

Sei

$$n_{A_0} = n_{\infty 0} + n'_{\infty 0} A^{-1/3} + \frac{1}{2} n''_{\infty 0} A^{-2/3} + O(A^{-1}). \quad (4.3.13)$$

Die Entwicklung von e_A ergibt:

$$e_A = e_{\infty} + \frac{\partial e_{\infty}}{\partial n_{\infty 0}} n'_{\infty 0} A^{-1/3} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 e_{\infty}}{\partial n_{\infty 0}^2} n_{\infty 0}'^2 + \frac{\partial e_{\infty}}{\partial n_{\infty 0}} n''_{\infty 0} \right) A^{-2/3} + O(A^{-1}). \quad (4.3.14)$$

Für r_A^2 erhalten wir:

$$r_A^2 = r_{\infty}^2 + \frac{\partial(r_{\infty}^2)}{\partial n_{\infty 0}} n'_{\infty 0} A^{-1/3} + O(A^{-2/3}), \quad (4.3.15)$$

also wegen (4.2.12):

$$r_A^2 = r_{\infty}^2 - \frac{2r_{\infty}^2}{3n_{\infty 0}} n'_{\infty 0} A^{-1/3} + O(A^{-2/3}). \quad (4.3.16)$$

Für die Entwicklung der Oberflächenenergie σ_A nach $A^{-1/3}$ ist zu beachten, dass σ_A einerseits ebenfalls über n_{A_0} von A abhängt. Andererseits ist σ_A aber auch noch über andere Größen, wie z.B. der $A^{-1/3}$ -proportionalen Kernkrümmung $\frac{2}{R_A}$ (vgl. (4.3.8)) von der Teilchenzahl abhängig, wie später genauer dargestellt werden soll.

In der Entwicklung

$$\sigma_A = \sigma_{\infty} + \sigma'_{\infty} A^{-1/3} + O(A^{-2/3}), \quad (4.3.17)$$

mit

$$\epsilon_{\infty}' = \frac{\partial \epsilon_{\infty}}{\partial n_{\infty_0}} n_{\infty_0}' + \hat{\epsilon}_{\infty}' \quad (4.3.18)$$

sei die A -Abhängigkeit von ϵ_A über n_A durch den ersten Term $\frac{\partial \epsilon_{\infty}}{\partial n_{\infty_0}} n_{\infty_0}'$ von (4.3.18) in der Ordnung $A^{-1/3}$ voll berücksichtigt. (vgl. 4.5.c))

Die Entwicklungen (4.3.14), (4.3.16) und (4.3.17/18) werden nun in den Ausdruck (4.2.18) für die Grundzustandsenergie eingesetzt. Es ergibt sich:

$$\begin{aligned} E_A = & \left[\epsilon_{\infty} + \frac{\partial \epsilon_{\infty}}{\partial n_{\infty_0}} n_{\infty_0}' A^{-1/3} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \epsilon_{\infty}}{\partial n_{\infty_0}^2} n_{\infty_0}'^2 + \frac{\partial \epsilon_{\infty}}{\partial n_{\infty_0}} n_{\infty_0}'' \right) A^{-2/3} \right] A + \\ & 4\pi \left[\tau_{\infty}^2 - \frac{2\tau_{\infty}^2}{3} n_{\infty_0}' A^{-1/3} \right] \left[\epsilon_{\infty} + \left(\frac{\partial \epsilon_{\infty}}{\partial n_{\infty_0}} n_{\infty_0}' + \hat{\epsilon}_{\infty}' \right) A^{-1/3} \right] A^{2/3} + \\ & + O(A^0). \end{aligned} \quad (4.3.19)$$

Gl. (4.3.19) ist die angestrebte Entwicklung der Grundzustandsenergie (4.2.3) nach Potenzen von $A^{1/3}$. Unter Ausnutzung dreier Stationaritätsbedingungen kann sie noch erheblich vereinfacht werden:

- 1) n_{∞_0} ist der Wert der Teilchendichte in Kernmaterie (d.h. tief im linken Halbraum der semiinfiniten Verteilung), bezüglich deren Variationen die Energie pro Teilchen, ϵ_{∞} , stationär ist:

$$\frac{\partial \epsilon_{\infty}}{\partial n_{\infty_0}} = 0. \quad (4.3.20)$$

- 2) Nach dem Theorem von W.D. Myers und W.I. Swiatecki¹³⁾ in Verbindung mit dem fundamentalen Satz von P. Hohenberg und W. Kohn²²⁾ (vgl. 4.5) ist die Oberflächenspannung der semiinfiniten Kernmaterie in HF - Theorie, $\tilde{\sigma}_\infty$, bezüglich Variationen der Kernmateriedichte $n_{\infty 0}$ stationär:

$$\frac{\partial \tilde{\sigma}_\infty}{\partial n_{\infty 0}} = 0. \quad (4.3.21)$$

Gl. (4.3.21) wird im Anhang 1 auch unabhängig von den oben genannten Autoren in HF - Theorie bewiesen.

- 3) Die Grundzustandsenergie E_A grosser Kerne ist in HF - Theorie stationär bezüglich Variationen der Kernmittelpunktsdichte $n_{A 0}$, denen solche der Dichtematrix $n(\vec{r}, \vec{r}')$ unter Berücksichtigung der Nebenbedingungen (3.5.18) und (3.5.19) entsprechen:

$$\frac{\partial E_A}{\partial n_{A 0}} = 0. \quad (4.3.22)$$

Unter Berücksichtigung von (4.3.22) differenzieren wir nun die rechte Seite von (4.3.19) nach $n_{A 0}$. Hierbei können wir wegen

$$n_{A 0} - n_{\infty 0} = n'_{\infty 0} A^{-1/3} + O(A^{-2/3}) \quad (4.3.23)$$

die Ableitung nach $n_{A 0}$ durch eine solche nach $n'_{\infty 0}$ ersetzen.

Es ergibt sich mit (4.3.20) und (4.3.21):

$$0 = \frac{\partial^2 e_\infty}{\partial n_{\infty 0}^2} n'_{\infty 0} - 4\pi \cdot \frac{2 r_0^2}{3 n_{\infty 0}} \tilde{\sigma}_\infty, \quad (4.3.24)$$

also

$$n'_{\infty 0} = 6 \frac{4\pi r_0^2 \tilde{\sigma}_\infty}{K} n_{\infty 0} > 0, \quad (4.3.25)$$

wobei wir

$$K = g n_{\infty}^2 \frac{\partial^2 \epsilon_{\infty}}{\partial n_{\infty}^2} \quad (4.3.26)$$

- in Anlehnung an G. Süßmann⁸⁰⁾ - nicht wie häufig als Kompressibilitäts-, sondern als Rigiditätskoeffizienten bezeichnen wollen. Er ist nämlich dem durch die Oberflächenspannung bedingten Anstieg $n_{\infty}' A^{-1/3}$ der Mittelpunktsdichte endlicher Kerne (vgl. (4.3.23/25)) gegenüber dem Kernmateriewert n_{∞} umgekehrt proportional und deswegen ein Maß für die Widerstandsfähigkeit von Kernmaterie gegenüber äusserem Druck.

Wir setzen (4.3.25) in (4.3.19) ein und erhalten:

$$E_A = \alpha_c A + \beta_c A^{2/3} + \gamma_c A^{1/3} + O(A^0), \quad (4.3.27)$$

mit

$$\alpha_c = \epsilon_{\infty}, \quad (4.3.28)$$

$$\beta_c = 4\pi r_0^2 \sigma_{\infty}, \quad (4.3.29)$$

$$\gamma_c = \gamma_{c, \text{curv}} + \gamma_{c, \text{comp}}, \quad (4.3.30)$$

wobei

$$\gamma_{c, \text{curv}} = 4\pi r_0^2 \sigma_{\infty}' (= 4\pi r_0^2 \sigma_{\infty}', \text{ vgl. (4.3.18/21)}), \quad (4.3.31)$$

$$\gamma_{c, \text{comp}} = - \frac{2\beta_c^2}{K}. \quad (4.3.32)$$

Es ist im Prinzip möglich, die Koeffizienten von (4.3.27) dadurch zu bestimmen, dass man mit einer fest vorgegebenen Nukleon - Nukleon - Wechselwirkung die Grundzustandsenergien einer Reihe grosser Kerne berechnet. Nach geeigneter Mittelung über Schaleneffekte ergibt sich damit E_A als Funktion von A , die rein numerisch nach Potenzen von $A^{1/3}$ entwickelt

werden kann. Solche Rechnungen wurden von Negele und Vautherin⁴⁰⁾ sowie von Moszkowski und Dworzecka³⁶⁾ durchgeführt. Sie erfordern wegen der grossen Anzahl von selbstkonsistent zu berechnenden HF - Einteilchenwellenfunktionen erhebliche Computer - Rechenzeiten.

Die Überlegungen des letzten Abschnittes haben jedoch ergeben, dass α_c , β_c und $\gamma_{c \text{ comp}}$ allein durch Grössen bestimmt werden, die sich in der Grenze $A \rightarrow \infty$, ergeben, also semiinfini - d.h. in einem Modell unendlich in den linken Halbraum ausgedehnter "Kernmaterie" mit ebener Oberfläche zum leeren rechten Halbraum - berechenbar sein sollten.

Es ist unser Ziel, $\gamma_{c \text{ curv}}$ in 4.6 mit Hilfe gewisser Stationaritätsaussagen aus 4.5 auf Grössen zurückzuführen, die sich ebenfalls aus einem rein semiinfiniten HF-Verfahren ergeben, d.h. nicht die Berechnung der Energie- und Teilchendichten endlicher Kerne erfordern.

4.4 Drei Theoreme

Zur Berechnung von $\gamma_{c \text{ curv}}$ ist die Ableitung von $\mathcal{E}_A$ nach $A^{-1/3}$ in der Grenze $A \rightarrow \infty$ zu bilden. Offensichtlich ist dazu unter anderem die Teilchenzahlabhängigkeit der Energiedichte η_A und der Teilchendichte n_A zu untersuchen.

In HF - Theorie wird die Energiedichte η_A bei vorgegebener effektiver Zweiteilchenwechselwirkung K durch die Dichtematrix $n_A(\vec{r}, \vec{r}')$ bestimmt (vgl. (3.6.28)). Nun ist

$$\eta_A(\vec{r}, \vec{r}') = \sum_{\nu=1}^A \varphi_{A, \nu}^*(\vec{r}') \varphi_{A, \nu}(\vec{r}) \quad (4.4.1)$$

eine Summe von A Einteilchenwellenfunktionen $\varphi_{A, \nu}$, deren A -Abhängigkeit für eine Berechnung von $\mathcal{E}_\infty'$ nun berücksichtigt werden müsste. Man kann jedoch dieses komplizierte Problem durch die folgenden Überlegungen umgehen:

- a) P. Hohenberg und W. Kohn²²⁾ haben zeigen können, dass die Grundzustandsenergie E ein eindeutiges Funktional der Teilchendichte n ist,

$$E = \int d^3r \eta(\vec{r}) = \int d^3r \eta[n(\vec{r})]. \quad (4.4.2)$$

Ausserdem gilt bezüglich Variationen δn der Teilchendichte, die die Teilchenzahl nicht verändern und die aus einem lokalen Zusatzpotential herleitbar sind:

$$\int d^3r E[n(\vec{r})] = 0. \quad (4.4.2)$$

(vgl. Anhang 2)

Über das Verfahren von Lagrange ergibt sich somit:

$$\delta \left\{ E[n(r)] - \Lambda \int d^3r n(r) \right\} = 0. \quad (4.4.4)$$

Wie in 5.2 erwähnt, ist die Gestalt des Funktionals $E[n(r)]$ im allgemeinen nicht a priori bekannt. Es gibt jedoch eine Reihe plausibler Ansätze hierfür.

- b) Ist die Gesamtenergie ein Funktional der Teilchendichte, so ist dies auch die Oberflächenspannung. In

$$\sigma_A = \sigma_A[\hat{n}_A(s)] \quad (4.4.5)$$

hängt sie auf zweifache Weise von A ab: "implizit" über das radiale Teilchendichteprofil $\hat{n}_A(s)$ (vgl. (4.3.7)), "explizit" über den Kernradius bzw. die Krümmung der Kernoberfläche. Dies ist übrigens schon aus Gl. (4.3.8) ersichtlich.

Aus (4.4.4) konnten W.D. Myers und W. J. Swiatecki¹³⁾ unter Berücksichtigung des Sättigungscharakters der Kernkräfte ein Theorem für die Oberflächenspannung grosser Kerne ableiten:

$$\sigma_A[\hat{n}_A(s) + \delta n(s)] = \sigma_A[\hat{n}_A(s)] + O\{\left[\delta n(s)\right]^2\}. \quad (4.4.6)$$

$\delta n(s)$ ist dabei eine kleine Variation von $\hat{n}_A(s)$, die in der "dünnen" Kernoberflächenzone beliebig, im Kerninneren konstant ist (d.h. die Dichte dort höchstens gleichmässig anhebt oder absenkt).

Wir wollen eine solche Variation "leptoderm" nennen, da sie den leptodermen Charakter der Dichteverteilung nicht verletzt. (4.4.6) besagt dann, dass ζ_A bezüglich leptodermmer Variationen der Teilchendichte stationär ist.

- c) Unabhängig von a) und b) konnte in Anhang 1 folgendes bewiesen werden:

Wir denken uns das HF - Einteilchenpotential U_0 der semiinfiniten Verteilung durch ein "Vergleichspotential" U_a ersetzt. Der Index a steht für einen Parametersatz, der das Vergleichspotential charakterisiert. n_0 sei die mit dem Fermiimpuls k_0 über

$$n_0 = \frac{2k_0^3}{3\pi^2} \quad (4.4.7)$$

(vgl. (5.2.3)) zusammenhängende Teilchendichte des homogenen Bereichs der semiinfiniten Verteilung. Für den Satz

$$u = u_0, \quad n_0 = n_{u_0} \quad (4.4.8)$$

von "HF-Parametern" gelte:

$$U_{u_0} = U_0, \quad \zeta_{n_{u_0}, u_0} = \zeta_0. \quad (4.4.9)$$

Die Oberflächenspannung ist dann bezüglich Variationen der Parameter um ihre "HF - Werte" stationär; es gilt also:

$$\frac{\partial \zeta_{n_{u_0}, u_0}}{\partial n_{u_0}} = 0, \quad (4.4.10)$$

und

$$\frac{\partial \zeta_{n_{u_0}, u_0}}{\partial u_0} = 0. \quad (4.4.11)$$

Gl. (4.4.11) wurde für dichteunabhängige Zweiteilchenwechselwirkungen von S. Knaak²⁶⁾ bewiesen; die Gültigkeit von (4.4.10) beachtet er jedoch nicht. Ein Beweis von Gl. (4.4.11) und Gl. (4.4.10) für dichteabhängige (mit Einschluss von Rearrangement - Termen) und dichteunabhängige Potentiale findet sich in Anhang 1. -

Gleichung (4.4.10) hatten wir bereits in 4.3 verwendet (Gl. (4.3.21)). Offensichtlich ist diese Aussage (4.4.10/11) mit der des Theorems von Myers und Swiatecki¹³⁾ in der Grenze $A \rightarrow \infty$ identisch, wenn die Oberflächenenergie nach Kohn und Hohenberg als Funktional des Teilchendichteprofiles $\hat{n}_\omega(s)$ geschrieben wird:

$$\sigma_\infty = \sigma_\infty[\hat{n}_\omega(s)] . \quad (4.4.12)$$

4.5 Krümmungsenergie

Wir dürfen nach (4.4.5) im folgenden davon ausgehen, dass

σ_A in der Form

$$\sigma_A = \sigma_A[\hat{n}_A(s)] \quad (4.5.1)$$

geschrieben werden kann. Implizit hängt die Oberflächenenergie auf diese Weise über das radiale Gleichgewichts - Teilchendichteprofil $\hat{n}_A(s)$, explizit über den Kernradius bzw. die Oberflächenkrümmung von der Teilchenzahl ab.

Für (4.5.1) ergibt sich

$$\sigma'_\infty = \left. \frac{\partial \sigma_A[\hat{n}_\infty(s)]}{\partial (A^{-1/3})} \right|_{R_A \rightarrow \infty} + \left. \frac{\partial \sigma_\infty[\hat{n}_A(s)]}{\partial (A^{-1/3})} \right|_{A \rightarrow \infty}. \quad (4.5.2)$$

Sei

$$\hat{n}_A(s) = \hat{n}_\infty(s) + \delta n(s) \quad (4.5.3)$$

die formale Entwicklung von $\hat{n}_A(s)$ nach Potenzen von $A^{-1/3}$,

mit

$$\delta n(s) = \hat{n}'_\infty(s) A^{-1/3} + O(A^{-2/3}). \quad (4.5.4)$$

Dann ist $\delta n(s)$ eine leptoderme Variation des radialen Teilchendichteprofiles, für die Gl. (4.4.6) in der Grenze $A \rightarrow \infty$ gültig ist, denn $\delta n(s)$ ist im Kerninneren konstant und berechnet sich dort gemäss (4.5.4) nach Gl. (4.3.25). Es ist somit:

$$\sigma_\infty[\hat{n}_A(s)] = \sigma_\infty[\hat{n}_\infty(s)] + O\{[\delta n(s)]^2\}. \quad (4.5.5)$$

Wegen Gl. (4.5.4) folgt:

$$\sigma_{\infty}[\hat{n}_A(s)] = \sigma_{\infty}[\hat{n}_{\infty}(s)] + O(A^{-2/3}). \quad (4.5.6)$$

Der zweite Term in Gl. (4.5.2) verschwindet also. Die implizite Teilchenzahlabhängigkeit der Oberflächenenergie σ_A über das radiale Teilchendichteprofil $\hat{n}_A(s)$ macht sich in der Ordnung $A^{-1/3}$ nicht bemerkbar. Bei der Berechnung von

$$\sigma_{\infty}' = \left. \frac{\partial \sigma_A[\hat{n}_{\infty}(s)]}{\partial (A^{-1/3})} \right|_{R_A \rightarrow \infty} \quad (4.5.7)$$

kann daher von vornherein das radiale Gleichgewichts-Teilchendichteprofil $\hat{n}_{\infty}(s)$ des semiinfiniten Falles zugrundegelegt werden. Somit haben wir im Prinzip das in der Schlussbemerkung von 4.3 gesteckte Ziel erreicht und $\gamma_c \text{ curv}$ (vgl. (4.3.31)) auf eine Grösse zurückgeführt, die sich rein semiinfinitt berechnen lässt. -

Ersetzen wir bei der Berechnung von σ_{∞}' von vornherein $\hat{n}_A(s)$ durch $\hat{n}_{\infty}(s)$, so lässt sich dieses Vorgehen folgendermaßen veranschaulichen:

Wir transformieren gewissermaßen die Oberflächenzone des gekrümmten endlichen Kernes lokal in die der semiinfiniten Kernmaterie:

$$\vec{r} = (x, y, z) \longrightarrow \vec{r}_t = (x_t, y_t, z_t) := (x, y, r), \quad (4.5.8)$$

und setzen dann

$$\hat{n}_A(s) = n_A(\vec{r}) \stackrel{!}{=} n_{\infty}(\vec{r}_t) = \hat{n}_{\infty}(s), \quad (4.5.9)$$

was zur Voraussetzung hat, daß Flächen gleicher Teilchendichte (Äquidensien) im gekrümmten Fall den gleichen Abstand haben, wie die entsprechenden Flächen gleicher Teilchendichte im semiinfiniten Fall. (vgl. Abb. 1)

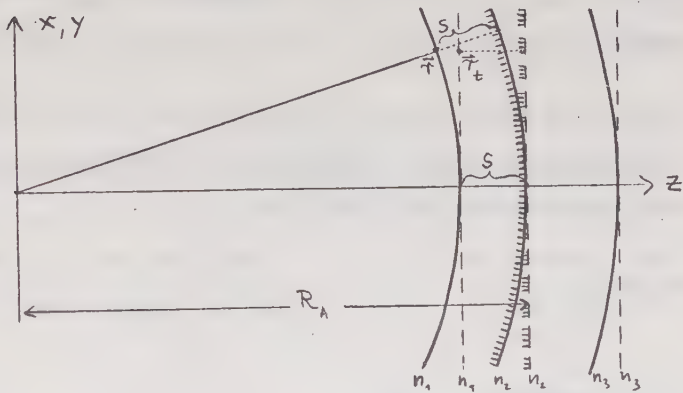


Abb. 1

Äquidensien der sphärischen und der ebenen Oberflächenzone



Äquidensie mit dem mittleren Radius R_A der sphärischen Verteilung



entsprechende Äquidensie der semiinfiniten Verteilung

Diese Voraussetzung dürfte im allgemeinen in der Ordnung $A^{-1/3}$ nicht erfüllt sein. Nach Gl. (4.5.3/4) ist vielmehr $\hat{n}_A(s) = \hat{n}_\infty(s) + \hat{n}'_\infty(s) A^{-1/3} + O(A^{-2/3})$, wobei $\hat{n}'_\infty(s)$ z.B. im Kerninneren wegen (4.3.25) nicht verschwindet.

Das Theorem von Myers und Swiatecki¹³⁾ führt jedoch zu der störungstheoretischen Aussage, dass Unterschiede in den Ab-

ständen der Äquidensien des gekrümmten und der entsprechenden des semiinfiniten Falles sich in erster Ordnung von $A^{-1/3}$ in der Oberflächenspannung nicht bemerkbar machen und man daher bei der Berechnung von σ_ω' statt des durch die Kernkrümmung "gestörten" Teilchendichteprofiles $\hat{n}_A(s) = \hat{n}_\omega(s) + \delta n(s)$ das "ungestörte" $\hat{n}_\omega(s)$ verwenden kann. -

Wir wollen diese Berechnung hier (in 4.5) bis zu dem Punkt weiterführen, an dem man sich auf eine bestimmte Gestalt der Energiedichte festlegen muss. -

Wegen

$$R_A = r_\omega A^{1/3} + r_\omega' + O(A^{-1/3}) \quad (4.5.10)$$

ist entsprechend (4.3.8)

$$\sigma_A = \sigma_A^g + \sigma_A^d, \quad (4.5.11)$$

mit

$$\sigma_A^g = \frac{2}{r_\omega} \int_{-\infty}^{+\infty} ds s [\hat{\eta}_A(s) - c_A \hat{n}_A(s)] A^{-1/3} + O(A^{-2/3}), \quad (4.5.12)$$

und

$$\sigma_A^d = \int_{-\infty}^{+\infty} ds [\hat{\eta}_A(s) - c_A \hat{n}_A(s)]. \quad (4.5.13)$$

Sei

$$\hat{\eta}_A(s) = \hat{\eta}_\omega(s) + \hat{\eta}_\omega'(s) A^{-1/3} + O(A^{-2/3}) \quad (4.5.14)$$

die Entwicklung des radialen Gleichgewichts-Energiedichteprofil nach Potenzen von $A^{-1/3}$.

Dann ist in

$$\sigma_\omega' = \sigma_\omega^g + \sigma_\omega^d \quad (4.5.15)$$

$\sigma_{\infty}'^g$ und $\sigma_{\infty}'^d$ durch

$$\sigma_{\infty}'^g = \frac{2}{r_{\infty}} \int_{-\infty}^{+\infty} ds \, s [\hat{\eta}_{\infty}(s) - e_{\infty} \hat{n}_{\infty}(s)], \quad (4.5.16)$$

und

$$\sigma_{\infty}'^d = \int_{-\infty}^{+\infty} ds \, \hat{\eta}_{\infty}'(s) \quad (4.5.17)$$

gegeben. In (4.5.17) wurde bereits von Gl. (4.5.7) Gebrauch gemacht.

Wir bezeichnen $\sigma_{\infty}'^g$ als geometrischen Anteil von σ_{∞}' : durch ihn wird die geometrische Tatsache berücksichtigt, dass sich in einem endlichen Bereich der Oberfläche im gekrümmten Fall weniger Teilchen aufhalten, als im ebenen Fall.

Im Gegensatz hierzu kann $\sigma_{\infty}'^d$ als dynamischer Anteil von σ_{∞}' angesehen werden, da sich in ihm der Einfluss der Krümmung auf das Energiedichteprofil $\hat{\eta}_A(s)$ bemerkbar macht.

Offensichtlich kann $\sigma_{\infty}'^g$ ohne weiteres mit den semiinfiniten Energie- und Teilchendichten ausgewertet werden, während in $\sigma_{\infty}'^d$ die Abhängigkeit des radialen Energiedichteprofiles von der Teilchenzahl berücksichtigt werden muss.

Das radiale Energiedichteprofil

$$\hat{\eta}_A(s) = \hat{\eta}_A[\hat{n}_A(s)] \quad (4.5.18)$$

hängt von A implizit über das radiale Teilchendichteprofil $\hat{n}_A(s)$ und möglicherweise auch explizit über den Kernradius R_A ab. Die implizite A - Abhängigkeit liefert je-

doch keinen Beitrag zu $G_{\infty}'^{\text{el}}$ (vgl. (4.5.7)). Für die Berechnung des dynamischen Anteils von G_{∞}' muss allein die explizite Abhängigkeit der Energiedichte η_A vom Kernradius R_A , d.h. im allgemeinen die genaue Gestalt des Funktionals (4.5.18) bekannt sein. - (vgl. das Rechenbeispiel im Anhang 3).

4.6 Hartree - Fock - Theorie der semiinfiniten Kernmaterie

Für die Berechnung der Koeffizienten der Massenformel braucht nach den Ergebnissen von 4.5 nur das semiinfinite HF - Problem gelöst zu werden.

Die HF - Einteilchenpotentiale in (3.6.32) sind dann nur noch Funktionen der z - Koordinate:

$$\tilde{U}_A(\vec{r}, \vec{\xi}) \longrightarrow \tilde{U}_\infty(z\vec{e}_z, \vec{\xi}), \quad (4.6.1)$$

$A \rightarrow \infty$:

$$U_A^R(\vec{r}) \longrightarrow U_\infty^R(z\vec{e}_z), \quad (4.6.2)$$

wenn wir die z - Richtung senkrecht zur ebenen Kernoberfläche wählen. - $\tilde{U}_\infty$ und U_∞^R beeinflussen dann die Bewegung der Nukleonen in x - und y -Richtung nicht mehr.

Die Einteilchenwellenfunktionen

$$\psi_E(\vec{r}) = \sqrt{\frac{1}{2\pi^3}} e^{i\vec{k}_\perp \vec{r}_\perp} \varphi_E(z), \quad (4.6.3)$$

die Lösungen der HF - Gleichungen

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left(-\frac{\partial^2}{\partial z^2} + k_\perp^2 \right) \varphi_E(z) + \int d^3\xi \tilde{U}_\infty \left[(z - \frac{1}{2}\xi_z) \vec{e}_z, \vec{\xi} \right] \cdot e^{-i\vec{k}_\perp \vec{\xi}_\perp} \varphi_E(z - \xi_z) + U_\infty^R(z\vec{e}_z) \varphi_E(z) = \varepsilon_\infty \varphi_E(z), \quad (4.6.4)$$

mit

$$\vec{k}_\perp = \vec{k} - k_z \vec{e}_z, \quad (4.6.5)$$

$$\vec{r}_\perp = \vec{r} - z \vec{e}_z, \quad (4.6.6)$$

$$\vec{\xi}_\perp = \vec{\xi} - \xi_z \vec{e}_z \quad (4.6.7)$$

sind, haben dann in Parallelrichtung zur ebenen Kernoberfläche dem Charakter ebener Wellen. -

Sei

$$U_{\infty}(z\vec{e}_z, \vec{\xi}) = \tilde{U}_{\infty}(z\vec{e}_z, \vec{\xi}) + U_{\infty}^R(z\vec{e}_z) \quad (4.6.8)$$

das HF - Gesamtpotential.

Die Wellenfunktionen

$$\varphi_{\varepsilon}(z) = \varphi(k_{\perp}, k_z, z) \quad (4.6.9)$$

gehören zu einem kontinuierlichen Spektrum von Eigenwerten

$$\varepsilon = \varepsilon(k) = \frac{k^2}{2m} k^2 + U_{\infty}(k), \quad (4.6.10)$$

wobei $U_{\infty}(k)$ die Fouriertransformierte des im Inneren der semioffenen Verteilung wegen der homogenen Verhältnisse nur noch von der "Nichtlokalitätskoordinate" $\vec{\xi}$ abhängenden HF - Gesamtpotentials

$$U_{\infty}(\vec{\xi}) = \lim_{z \rightarrow -\infty} U_{\infty}(z\vec{e}_z, \vec{\xi}) \quad (4.6.11)$$

darstellt.

Die Wellenfunktionen $\varphi(k_{\perp}, k_z, z)$ besitzen die asymptotischen Eigenschaften

$$\varphi(k_{\perp}, k_z, z) \longrightarrow \begin{cases} 0 & \text{für } z \longrightarrow +\infty \\ \sin[-k_z z + \vartheta(k_{\perp}, k_z)] & \text{für } z \longrightarrow -\infty \end{cases} \quad (4.6.12)$$

Es lässt sich zeigen³³⁾, dass für grosse L gilt:

$$\int_{-L}^{\infty} dz \varphi^*(k_{\perp}, k'_z, z) \varphi(k_{\perp}, k_z, z) = \frac{1}{2} \left\{ \frac{-\sin[(k_z + k'_z)L + \vartheta + \vartheta']}{k_z + k'_z} + \frac{\sin[(k'_z - k_z)L + \vartheta' - \vartheta]}{k'_z - k_z} \right\}. \quad (4.6.13)$$

Für $L \rightarrow \infty$ folgt die Orthonormierungsrelation

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dz \varphi^*(k_z, k_z', z) \varphi(k_z, k_z, z) = \frac{\pi}{2} [-\delta(k_z + k_z') + \delta(k_z - k_z')]. \quad (4.6.14)$$

Die HF - Einteilchenpotentiale hängen über die Dichtematrix

$$\tilde{n}_{\omega}(\vec{r}, \vec{\xi}) = \frac{8}{(2\pi)^3} \int d^3k \Theta(k_{\omega_0} - k) e^{i\vec{k} \cdot \vec{\xi}} \varphi^*(k_z, k_z, z - \frac{1}{2} \xi_z) \cdot \varphi(k_z, k_z, z + \frac{1}{2} \xi_z) \quad (4.6.15)$$

gemäss Gl. (3.6.30/33) selbstkonsistent von den Wellenfunktionen ab. In (4.6.15) wurde die Summation über die diskrete Folge von Indices durch eine Impulsraumintegration über die "Fermikugel" mit dem Radius k_{ω_0} ersetzt^{3,8,10)}.

Die in diesem Zusammenhang auftretenden Fragen der Konvergenz des selbstkonsistenten Verfahrens bei Vorgabe der physikalischen Randbedingungen, die die Kernoberfläche definieren, werden von Köhler^{9,15)} diskutiert. Vollselbstkonsistente semi-infinite HF - Rechnungen stellt ausserdem Keller an.⁸¹⁾

Aus (4.6.12) und (4.6.15) folgt für das Verhalten der Dichtematrix tief im Inneren der semiinfiniten Verteilung:

$$\lim_{z \rightarrow -\infty} \tilde{n}_{\omega}(z \vec{e}_z, \vec{\xi}) = \frac{2k_{\omega_0}^3}{3\pi^2} \frac{3J_1(k_{\omega_0} \xi)}{k_{\omega_0} \xi}. \quad (4.6.16)$$

5 Spezialisierung auf das Moszkowski - Potential (MDI)

5.1 Gesamtenergie und Hartree - Fock - Gleichungen

Wir wählen für unsere Rechnungen einen von S. Moszkowski¹⁷⁾ angegebenen effektiven Ansatz im Sinne von 3.4 für die Bruecknersche K - Matrix, der die Wechselwirkung der Kernbausteine im nuklearen Medium beschreiben soll. Wie erwähnt, legt man hierbei weniger Wert darauf, eine Beziehung zu einem realistischen freien Zweinukleonenpotential herzustellen, mit dem man z.B. die niederenergetischen Streuphasen reproduzieren kann. Man versucht vielmehr unter Berücksichtigung allgemeiner Kriterien für die Struktur der K - Matrix einen Ansatz zu finden, mit dem mittleren Kerneigenschaften, wie Bindungsenergien und Kernradien, richtig beschrieben werden können.

Sei

$$\langle \vec{r}_1 \vec{r}_2 | K | \vec{r}_1' \vec{r}_2' \rangle = \delta(\vec{R} - \vec{R}') \langle \vec{r} | K_{MDI} [u(\vec{R})] | \vec{r}' \rangle, \quad (5.1.1)$$

wobei

$$\vec{R} = \frac{1}{2} (\vec{r}_1 + \vec{r}_2), \quad \vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2, \quad (5.1.2)$$

(vgl. (3.6.21)), mit

$$\begin{aligned} \langle \vec{r} | K_{MDI} [u(\vec{R})] | \vec{r}' \rangle &= -\alpha \delta(\vec{r}) \delta(\vec{r}') - \\ &\quad \frac{1}{2} \beta [\delta(\vec{r}) \delta(\vec{r}') \vec{\nabla}_{\vec{r}}^2 + \vec{\nabla}_{\vec{r}}^2 \delta(\vec{r}) \delta(\vec{r}')] + \\ &\quad \gamma \left(\frac{3\pi^2}{2} \right)^{2/3} u^{2/3}(\vec{R}) \delta(\vec{r}) \delta(\vec{r}'). \end{aligned} \quad (5.1.3)$$

Diese effektive Zweiteilchenwechselwirkung ist eine vereinfachte Form der für Kernstrukturrechnungen häufig verwendeten Skyrme - Kraft.⁷⁴⁾ Letztere enthält noch einen Term

$$\eta \delta(\vec{R} - \vec{R}') \frac{\vec{\nabla}_r}{\nabla_r} \delta(\vec{r}) \delta(\vec{r}') \vec{\nabla}_{r'}, \quad (5.1.4)$$

der - im Gegensatz zur MDI - auch nichtverschwindende Matrixelemente zwischen Zweiteilchenzuständen ungerader Parität besitzt. - Negele und Vautherin⁴⁰⁾ zeigen jedoch, dass der Koeffizient η in HF - Rechnungen nur sehr klein gegenüber β sein sollte.

Die Wignertransformierte des dichteunabhängigen Teiles von (5.1.1/3) hat die Form

$$K_w = -\alpha \delta(\vec{r}) + \beta \vec{p}^2 \delta(\vec{r}). \quad (5.1.5)$$

(5.1.1/3) ist also ein besonders einfacher Ansatz für die nichtlokale (impulsabhängige) Bruecknersche K - Matrix. Der zusätzlich auftretende dichteabhängige Term berücksichtigt den hard core sowie die Wirkung der Tensorkraft (vgl. 3.3). Nach einem Vorschlag von Bethe⁶⁹⁾ setzt man ihn proportional zu $n^{2/3}$. Impuls- und dichteabhängige (β - und γ -proportionale), für grosse Impulse und Teilchendichten abstossend wirkende Terme in (5.1.1/3) wirken der lokalen, α -proportionalen attraktiven δ -Kontaktkraft entgegen und führen somit zur Sättigung.

Man kann die Dichteabhängigkeit in (5.1.1/3) übrigens auch aus einer Dreiteilchen - Kontaktkraft

$$t_3 \delta(r_{123}) = t_3 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_3) \quad (5.1.6)$$

herleiten⁸²⁾. Für $N = Z$ - Kerne ist dann

$$t_3 = 6\gamma. \quad (5.1.7)$$

Die drei Parameter α , β und γ können an gewisse experimentell bekannte Kerndaten angepasst werden.

Wir wollen nun mit (5.1.1/3) die zu K_{MDI} gehörige Gesamtenergie berechnen. Hierbei ist zu beachten, dass diese Wechselwirkung durch die δ - Funktionen in den Relativkoordinaten im Ortsanteil antisymmetrische Zweiteilchenzustände wegprojiziert. Da die Gesamtwellenfunktion antisymmetrisch sein soll, können wir in (3.5.6)

$$K_{00} = K_{11} = 0, \quad (5.1.8)$$

$$K_{01} = K_{10} = K_{MDI} \quad (5.1.9)$$

setzen.

Es ergibt sich gemäss (3.6.22):

$$\begin{aligned} E = & -\frac{\hbar^2}{2m} \int d^3r \vec{\nabla}_r^2 n(\vec{r}, \vec{r}) \Big|_{\vec{r}'=\vec{r}} - \frac{3}{16} \int d^3r d^3r' \cdot \\ & [\langle \vec{r} | K_{MDI} | \vec{r}' \rangle + \langle \vec{r} | K_{MDI} | -\vec{r}' \rangle] \cdot \\ & n(\vec{r} + \frac{\vec{r}'}{2}, \vec{r} - \frac{\vec{r}'}{2}) n(\vec{r} - \frac{\vec{r}'}{2}, \vec{r} + \frac{\vec{r}'}{2}), \end{aligned} \quad (5.1.10)$$

Offensichtlich leisten direkter Anteil und Austauschanteil hier den gleichen Beitrag zur Gesamtenergie.

Aus (5.1.10) folgt:

$$\begin{aligned} E = & -\frac{\hbar^2}{2m} \int d^3r \vec{\nabla}_r^2 n(\vec{r}, \vec{r}) \Big|_{\vec{r}'=\vec{r}} + \frac{3}{16} \int d^3r \{ -2\alpha n^2(\vec{r}) - \\ & \frac{\beta}{2} [n(\vec{r}) (\vec{\nabla}_r^2 + \vec{\nabla}_{r'}^2) n(\vec{r}, \vec{r}) \Big|_{\vec{r}'=\vec{r}} - (\vec{\nabla}_r n(\vec{r}, \vec{r}) \Big|_{\vec{r}'=\vec{r}})^2 - \\ & (\vec{\nabla}_{r'} n(\vec{r}, \vec{r}) \Big|_{\vec{r}'=\vec{r}})^2] + 2\gamma \left(\frac{3\pi^2}{2} \right)^{2/3} n^{8/3}(\vec{r}) \}. \end{aligned} \quad (5.1.11)$$

Sei

$$\tau(\vec{r}) = \frac{1}{2} \vec{\nabla}_r \vec{\nabla}_r n(\vec{r}, \vec{r}') \Big|_{\vec{r}' = \vec{r}} - \frac{1}{4} (\vec{\nabla}_r^2 + \vec{\nabla}_{r'}^2) n(\vec{r}, \vec{r}') \Big|_{\vec{r}' = \vec{r}}, \quad (5.1.12)$$

also

$$(\vec{\nabla}_r^2 + \vec{\nabla}_{r'}^2) n(\vec{r}, \vec{r}') \Big|_{\vec{r}' = \vec{r}} = \frac{1}{2} \vec{\nabla}_r^2 n(\vec{r}) - 2 \tau(\vec{r}). \quad (5.1.13)$$

Durch partielle Integration erhält man die Beziehung

$$\int d^3r \tau(\vec{r}) = - \int d^3r \vec{\nabla}_r^2 n(\vec{r}, \vec{r}') \Big|_{\vec{r}' = \vec{r}}, \quad (5.1.14)$$

und

$$\int d^3r n(\vec{r}) \vec{\nabla}_r^2 n(\vec{r}) = - \int d^3r (\vec{\nabla}_r n(\vec{r}))^2. \quad (5.1.15)$$

Wegen (3.5.20) gilt:

$$\vec{\nabla}_r n(\vec{r}, \vec{r}') \Big|_{\vec{r}' = \vec{r}} = \vec{\nabla}_r n(\vec{r}, \vec{r}) \Big| = \frac{1}{2} \vec{\nabla}_r n(\vec{r}). \quad (5.1.16)$$

Dann folgt

$$E = \int d^3r \eta(\vec{r}), \quad (5.1.17)$$

wobei

$$\eta(\vec{r}) = \frac{\hbar^2}{2m} \tau(\vec{r}) + \frac{3}{4b} \left\{ -2\alpha n^2(\vec{r}) + \beta n(\vec{r}) \tau(\vec{r}) + \frac{\beta}{2} [\vec{\nabla}_r n(\vec{r})]^2 + 2\gamma \left(\frac{3\pi^2}{2}\right)^{2/3} n^{5/3}(\vec{r}) \right\}. \quad (5.1.18)$$

• Nach (3.6.32) erhalten wir für die zu (5.1.17/18) gehörende HF - Gleichung:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}_r^2 \varphi_{E_\epsilon}(\vec{r}) + \tilde{U} \varphi_{E_\epsilon}(\vec{r}) + U^R \varphi_{E_\epsilon}(\vec{r}) = E_\epsilon \varphi_{E_\epsilon}(\vec{r}), \quad (5.1.19)$$

mit

$$\tilde{U} = \frac{3}{8} \left\{ -2\alpha n(\vec{r}) - \frac{1}{2} \beta [n(\vec{r}) \vec{\nabla}_r^2 + (\vec{\nabla}_r^2 n(\vec{r}, \vec{r}') \Big|_{\vec{r}' = \vec{r}})] + \vec{\nabla}_r^2 n(\vec{r}) + 2(\vec{\nabla}_r n(\vec{r}, \vec{r}') \Big|_{\vec{r}' = \vec{r}}) \vec{\nabla}_r \right\} + 2\gamma \left(\frac{3\pi^2}{2}\right)^{2/3} n^{5/3}(\vec{r}), \quad (5.1.20)$$

und

$$U^R = \frac{1}{4} \gamma \left(\frac{3\pi^2}{2} \right)^{2/5} n^{5/5}(\vec{r}) . \quad (5.1.21)$$

U^R entspricht dem Rearrangement - Zusatzterm zum HF - Potential, der durch die Dichteabhängigkeit von K_{MDI} entsteht (vgl. (3.6.15))

Die in (5.1.1/3) gewählte einfache Wechselwirkung führt wegen ihres Kontaktcharakters also nicht zu gekoppelten HF - Integrodifferentialgleichungen, sondern zu einem System von Differentialgleichungen, die sich vom normalen Schrödinger-Typ aber insofern unterscheiden, als dass sie auch erste Ableitungen der Wellenfunktionen nach der Ortskoordinate enthalten.

5.2 Energie- Dichtefunktional

Zur Berechnung des Koeffizienten γ_c _{curv} der Massenformel ist es nach den Überlegungen in 4.5 wesentlich, dass der Oberflächenenergiekoeffizient σ als Funktional der Teilchendichte geschrieben werden kann.

Wie schon in 4.4 erwähnt, konnten P. Hohenberg und W. Kohn²²⁾ beweisen, dass der gesamte HF - Vielteilchenzustand eindeutig durch die Teilchendichte bestimmt wird. Leider liefert dieser sehr allgemeine Satz nicht gleichzeitig eine Konstruktionsvorschrift für diese funktionale Abhängigkeit. Diese wird in der Arbeit von Stoddart und March⁸³⁾ zwar gegeben, doch sind die dort auftretenden Ausdrücke äusserst kompliziert; ihre Auswertung gelang bis jetzt nur für besonders einfache Fälle.

Es gibt jedoch^{11,84,85)} erprobte Ansätze für das Energie-Dichtefunktional $\eta[n(\vec{r})]$, die von der Theorie der Kernmaterie ausgehen; dort ist $\eta_\infty[n_\infty]$ von vorneherein eine Funktion allein der (konstanten) Teilchendichte. Man versucht dann, diese Überlegungen auf endliche Kerne zu übertragen, indem man die funktionale Abhängigkeit von Energie- und Teilchendichte in Kernmaterie übernimmt, aber die Teilchendichte jetzt vom Ort abhängen lässt (Thomas - Fermi - Theorie). Da diese Näherung für Gebiete mit starken Dichtegradienten jedoch versagt, fügt man zu $\eta_\infty[n(\vec{r})]$ noch gewisse Korrekturglieder, die den raschen Abfall von

$n(\vec{r})$ in der Kernoberflächen berücksichtigen ¹⁾ (Gradiententerme).

Die verbleibende - unvermeidliche - Willkür in der Wahl des Energie - Dichtefunktional hat eine deutliche Parallelität zu der Unsicherheit, die bezüglich der Gestalt der effektiven Nukleon - Nukleon - Wechselwirkung in Kernstrukturrechnungen besteht. Auch hier wird der Ansatz letztlich erst durch Vergleich mit gewissen empirischen Daten gerechtfertigt. -

Der mit der MDI - Wechselwirkung gewonnene Ausdruck für die Energiedichte ist eine Funktion von $n(\vec{r})$ und - als einzigem nichtdiagonalen Element der Dichtematrix - von $\chi(\vec{r})$. Offensichtlich muss dann $\chi(\vec{r})$ ebenfalls als Funktion von $n(\vec{r})$ darstellbar sein.

Ausgehend von der Theorie der Kernmaterie konstruieren wir einen Ansatz für

$$\chi(\vec{r}) = \chi[n(\vec{r})]. \quad (5.2.1)$$

In Kernmaterie sind die Lösungen der HF - Gleichung ebene Wellen; ihre Aufsummation zur Dichtematrix ergibt (vgl. (4.6.16)) :

$$\tilde{n}_w(\vec{\xi}) = \frac{2k_{w0}^3}{3\pi^2} \frac{3j_1(k_{w0}\xi)}{k_{w0}\xi}. \quad (5.2.2)$$

Für $\vec{\xi} = 0$ erhält man hieraus die Teilchendichte

$$n_{w0} = \frac{2k_{w0}^3}{3\pi^2}. \quad (5.2.3)$$

Für die Dichte der kinetischen Energie ergibt sich aus (5.2.2) in Verbindung mit (5.1.12)

$$\epsilon_{\infty 0} = \frac{3}{5} \left(\frac{3\pi^2}{2} \right)^{2/3} n_{\infty 0}^{5/3}. \quad (5.2.4)$$

In Thomas - Fermi - Theorie dehnt man die Vorstellung, dass die Nukleonen sich im Kerninneren wie freie Teilchen bewegen, auch auf die Kernoberflächenzone aus. Dort ist die Teilchendichte nicht mehr räumlich konstant. Dieser Tatsache trägt man jedoch dadurch Rechnung, dass man mit

$$k(\vec{r}) = \left(\frac{3\pi^2 n(\vec{r})}{2} \right)^{1/3} \quad (5.2.5)$$

einen "ortsabhängigen Fermiimpuls" als maximalen Impuls für die zur Dichtematrix aufzusummierenden ebenen Wellen wählt.

Aus (5.2.2) wird dann:

$$\tilde{n}^{TF}(\vec{r}, \vec{\xi}) = n(\vec{r}) \frac{3j_1(k(\vec{r})\xi)}{k(\vec{r})\xi} \quad (5.2.6)$$

(Slater - Approximation)^{86,87)}.

Wir erhalten weiter

$$\nabla_{\vec{r}}^2 n^{TF}(\vec{r}, \vec{r}') \Big|_{\vec{r}' = \vec{r}} = \left[\frac{1}{4} \nabla_{\vec{r}}^2 n(\vec{r}) - \frac{3}{5} \left(\frac{3\pi^2}{2} \right)^{2/3} n^{5/3}(\vec{r}) \right]. \quad (5.2.7)$$

Nach (5.1.13) und (5.2.7) finden wir

$$\epsilon^{TF}(\vec{r}) = \frac{3}{5} \left(\frac{3\pi^2}{2} \right)^{2/3} n^{5/3}(\vec{r}). \quad (5.2.8)$$

Das ist die kinetische Energiedichte der TF - Theorie der Kernoberfläche.

Myers und Swiatecki¹³⁾ leiten in diesem Zusammenhang ein Kriterium für die Güte der TF - Näherung her. Danach soll für Bereiche, in denen

$$\frac{|\vec{\nabla}_r n(\vec{r})|}{n^{4/3}(\vec{r})} \lesssim 10, \quad (5.2.9)$$

die TF - Theorie einen Fehler von höchstens 10 % gegenüber Schalenmodellrechnungen aufweisen. In der Kernoberfläche kann man demnach für

$$n(\vec{r}) \geq \frac{1}{6} n_0. \quad (5.2.10)$$

die Relation (5.2.9) als erfüllt ansehen.

C.F. v. Weizsäcker¹⁾ machte 1935 den Vorschlag, die Abweichung der kinetischen Energiedichte in Thomas - Fermi - Theorie von ihrem HF - Wert durch Hinzufügen eines Gradiententermes

$$\frac{1}{4} \frac{[\vec{\nabla}_r n(\vec{r})]^2}{n(\vec{r})} \quad (5.2.11)$$

zu berücksichtigen. Zahlreiche Autoren⁸⁸⁻¹¹⁰⁾ haben seitdem versucht, diesen Ansatz theoretisch zu begründen und nach Möglichkeit zu verfeinern. Berg und Wilets^{89,90)} zeigten, dass man (5.2.11) mit einem Faktor ϕ zwischen $\frac{1}{2}$ und $\frac{1}{8}$ multiplizieren sollte, um eine bessere Übereinstimmung mit den Ergebnissen von Schalenmodellrechnungen zu erhalten. Später verwenden sie $\phi = \frac{1}{9}$; Kirzhnits⁹³⁾ bestätigt diesen Wert.

ϕ ist sicher keine universellen Grösse, sondern hängt im Sinne des Theorems von Hohenberg und Kohn im Prinzip von der Teilchendichte und damit implizit vom Zweiteilchenpotential ab.⁸⁹⁾

Für die Berechnung des Krümmungsenergiekoeffizienten approximieren wir in 5.3 die kinetische HF - Energiedichte durch den Ansatz

$$\gamma^{TFW}(\vec{r}) = \frac{3}{5} \left(\frac{3\pi^2}{2} \right)^{2/3} n^{5/3}(\vec{r}) + \phi \cdot \frac{1}{4} \frac{[\vec{\nabla} \psi(\vec{r})]^2}{n(\vec{r})}. \quad (5.2.12)$$

Die Ergebnisse von (4.5) sind dann unmittelbar auf die MDI - Energiedichte anwendbar, da in (5.1.18) alle Grössen direkt auf die Teilchendichte zurückgeführt sind. Den Parameter ϕ passen wir an die Ergebnisse einer exakten HF - Rechnung an.

5.3 Oberflächenspannung und Krümmungsenergie

Die MDI - Oberflächenspannung

$$\sigma_A = \sigma_A^g + \sigma_A^d, \quad (5.3.1)$$

mit

$$\sigma_A^g = \frac{2}{r_\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} ds \, s \cdot [\hat{\gamma}_A(s) - c_A \hat{n}_A(s)] A^{-1/3} + O(A^{-2/3}), \quad (5.3.2)$$

$$\sigma_A^d = \int_{-\infty}^{+\infty} ds \, [\hat{\gamma}_A(s) - c_A \hat{n}_A(s)], \quad (5.3.3)$$

wobei

$$\hat{\gamma}_A(s) = \frac{\kappa^2}{2m} \hat{\tau}_A(s) + \frac{3}{76} \left\{ -2\alpha \hat{n}_A^2(s) + \beta \hat{n}_A(s) \hat{\tau}_A(s) + \frac{\beta}{2} \left[\frac{\partial \hat{n}_A(s)}{\partial s} \right]^2 + 2\gamma \left(\frac{3\pi^2}{2} \right)^{2/3} \hat{n}_A^{8/3}(s) \right\}, \quad (5.3.4)$$

(vgl. (4.3.8) sowie (4.5.11/12/13)), hängt auf zweifache Weise von A ab: "Implizit" über die radialen Teilchendichte- und kinetischen Energiedichteprofile $\hat{n}_A(s)$ und $\hat{\tau}_A(s)$, "explizit" über den Kernradius bzw. die Krümmung der Kernoberfläche, vgl. (4.3.8). Für $A \rightarrow \infty$ geht σ_A in σ_∞ , die Oberflächenspannung der semiinfiniten Kernmaterie über, die mit dem Oberflächenenergiekoeffizienten β_c über Gl. (4.3.29) zusammenhängt.

Zur Berechnung des Krümmungsenergiekoeffizienten γ_c *curv* ist die Ableitung von σ_A nach $A^{-1/3}$ in der Grenze $A \rightarrow \infty$ zu bilden (vgl. (4.3.31)). -

Nach dem Theorem von Kohn und Hohenberg ist die kinetische Energiedichte selbst ein Funktional der Teilchendichte,

so dass in

$$\hat{\chi}_A(s) = \hat{\chi}_A[\hat{n}_A(s)] \quad (5.3.5)$$

ebenfalls eine A - Abhängigkeit über das Teilchendichteprofil $\hat{n}_A(s)$ von einer solchen über die Kernkrümmung zu unterscheiden ist. Nach dem Theorem von Myers und Swiatecki leistet die A - Abhängigkeit des Teilchendichteprofiles bei der Berechnung von $\gamma_{\text{C curv}}$ keinen Beitrag:

$$\gamma_{\text{C curv}} = 4\pi r_\omega^2 \frac{\partial}{\partial(h^{-1/3})} \mathcal{G}_A[\hat{n}_\omega(s), \hat{\chi}_A[\hat{n}_\omega(s)]] \Big|_{A \rightarrow \infty} \quad (5.3.6)$$

Im Prinzip kommt man bei diesem Problem also mit der Lösung der HF - Gleichungen der semilinearisierten Kernmaterie aus. Praktische Voraussetzung hierfür ist jedoch, dass die Gestalt der Funktion $\hat{\chi}_A[\hat{n}_\omega(s)]$ bekannt ist oder eine geeignete Näherung für sie angegeben werden kann.

Für die Berechnung des Krümmungsenergiekoeffizienten gemäss (5.3.6) approximieren wir $\chi[n]$ durch den Ansatz

$$\chi^{\text{TFW}} = \frac{3}{5} \left(\frac{3\pi^2}{2} \right)^{2/3} n^{5/3} + \phi \cdot \frac{1}{4} \frac{(\nabla n)^2}{n} \quad (5.3.7)$$

(vgl. (5.2.12)). Den Parameter ϕ passen wir später numerisch an den exakten HF - Wert von ζ_∞ an.

Entsprechend den Überlegungen in 4.5 liefert $\mathcal{G}_A^g$ einen geometrischen, und $\mathcal{G}_A^d$ einen "dynamischen" Beitrag zu ζ_∞' :

$$\zeta_\infty' = \zeta_\infty'^g + \zeta_\infty'^d \quad (5.3.8)$$

Hierbei ist

$$\sigma_{\infty}^{(g)} = \frac{2}{\pi\omega} \int_{-\infty}^{+\infty} ds \cdot \left\{ \frac{k^2}{2m} \hat{\tau}_{\omega}^{TFW}(s) + \frac{3}{16} \left[-2\alpha \hat{n}_{\omega}^2(s) + \right. \right. \\ \left. \left. \beta \hat{n}_{\omega}(s) \hat{\tau}_{\omega}^{TFW}(s) + \frac{\beta}{2} \left[\frac{\partial \hat{n}_{\omega}(s)}{\partial s} \right]^2 + 2\gamma \left(\frac{3\pi^2}{2} \right)^{2/3} \hat{n}_{\omega}^{2/3}(s) \right] \right\}, \quad (5.3.9)$$

und

$$\sigma_{\infty}^{(d)} = \int ds \frac{\partial}{\partial(A^{-1/3})} \left\{ \frac{k^2}{2m} \hat{\tau}_A^{TFW}[\hat{n}_{\omega}(s)] + \frac{3}{16} \beta \hat{n}_{\omega}(s) \hat{\tau}_A^{TFW}[\hat{n}_{\omega}(s)] \right\} \Big|_{A \rightarrow \infty}. \quad (5.3.10)$$

Bei der Berechnung von (5.3.10) ist zu beachten⁺), dass

$$\left[\vec{\nabla}_r n(\vec{r}) \right]^2 = \left[\frac{\partial n(r)}{\partial r} \right]^2 = \left[\frac{\partial \hat{n}_A(s)}{\partial s} \right]^2. \quad (5.3.11)$$

Es ergibt sich deswegen

$$\frac{\partial}{\partial(A^{-1/3})} \hat{\tau}_A^{TFW} \Big|_{A \rightarrow \infty} = 0. \quad (5.3.12)$$

Hieraus folgt:

$$\sigma_{\infty}^{(d)} = 0. \quad (5.3.13)$$

Der dynamische Krümmungsbeitrag verschwindet also. -

Es muss in diesem Zusammenhang erwähnt werden, dass in dem Ausdruck (5.1.18) der MDI - Energiedichte $\eta(r)$ die übliche Form der kinetischen Energiedichte

$$\eta_{kin}(r) = -\nabla_r^2 n(\vec{r}, \vec{r}) \Big|_{\vec{r}=\vec{r}} = \tau(r) - \frac{1}{4} \vec{\nabla}_r^2 n(r) \quad (5.3.14)$$

⁺) Von (5.3.11) hatten wir schon in (5.3.4) Gebrauch gemacht.

durch $\chi(r)$ ersetzt wurde. Es ist nämlich

$$\int d^3r \vec{\nabla}_r^2 \chi(r) = 4\pi \int_0^\infty dr r^2 \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right] \chi(r) = 0. \quad (5.3.15)$$

Wir wollen zeigen, dass die verwendeten Definitionen von Oberflächenspannung und Krümmungsenergie nicht von der speziell gewählten Form der kinetischen Energiedichte abhängen.

Würde man zur rechten Seite von (5.1.18) einen Term $\vec{\nabla}^2 \bar{n}$ addieren, so ergäbe sich offensichtlich eine zusätzliche Oberflächenspannung

$$\vec{\nabla} \bar{G}_A = \int_{-\infty}^{+\infty} ds \left[1 + \frac{zs}{R_A} + \frac{s^2}{R_A^2} \right] \left[\frac{\partial^2 \bar{n}_A(s)}{\partial s^2} + \frac{2}{s+R_A} \frac{\partial \bar{n}_A(s)}{\partial s} \right]. \quad (5.3.16)$$

Hieraus ergibt sich als zusätzliche Oberflächenspannung der semiinfiniten Kernmaterie:

$$\vec{\nabla} \bar{G}_\infty = \int_{-\infty}^{+\infty} ds \frac{\partial^2 \bar{n}_\infty(s)}{\partial s^2} = 0, \quad (5.3.17)$$

und ein nicht verschwindender geometrischer Beitrag zur Krümmungsenergie

$$\vec{\nabla} \bar{G}'_\infty = \frac{2}{r_\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} ds s \frac{\partial^2 \bar{n}_\infty(s)}{\partial s^2}. \quad (5.3.18)$$

Dem steht ein zusätzlicher, ebenfalls nicht verschwindender dynamischer Krümmungsterm

$$\vec{\nabla} \bar{G}''_\infty = \frac{2}{r_\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} ds \frac{\partial \bar{n}_\infty(s)}{\partial s} \quad (5.3.19)$$

gegenüber. Die Summe von $\frac{\nabla}{6_\infty} y'$ und $\frac{\nabla}{6_\infty} d'$ ist jedoch gleich Null.

Oberflächenspannung und Krümmungsenergie hängen also nicht davon ab, ob man $\mathcal{L}(\tau), \vec{\nabla}_{\vec{r}'}^2 u(\vec{r}', \vec{r}') \big|_{\vec{r}'=\vec{r}}$ oder $\vec{\nabla}_{\vec{r}'} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}'} u(\vec{r}', \vec{r}') \big|_{\vec{r}'=\vec{r}}$ als kinetische Energiedichte verwendet. Diese Grössen unterscheiden sich nämlich alle um einen zu $\nabla^2 n$ proportionalen Beitrag.^{+))}

In völlig analoger Weise kann man übrigens auch zeigen, dass in der Energiedichte (5.1.18), der Term $(\nabla u)^2$ durch $-n \nabla^2 n$ ersetzt werden kann, ohne dass sich die Gesamtenergie, die Oberflächenspannung oder die Krümmungsenergie ändert.

^{+))} Es ist

$$\vec{\nabla}_{\vec{r}'} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}'} u(\vec{r}', \vec{r}') \big|_{\vec{r}'=\vec{r}} = \mathcal{L}(\tau) + \frac{1}{6} \vec{\nabla}_{\vec{r}'}^2 u(\tau), \quad (5.3.20)$$

(vgl. (5.1.12) und (5.3.14)).

6 Rechnungen

6.1 MDI-Potentialkonstanten und -Sättigungseigenschaften

Die Grössen α , β und γ in (5.1.3) können durch die Forderung bestimmt werden, dass die MDI - Wechselwirkung in HF - Rechnung experimentell ermittelte Daten von endlichen Kernen sowie solche von Kernmaterie reproduziert.

Moszkowski¹⁷⁾ passt die Parameter an die Werte des Fermiimpulses von ^{208}Pb , der Energie pro Teilchen von Kernmaterie, sowie der Bindungsenergie von ^{16}O an und erhält:

$$\alpha = 1160 \quad \text{MeV fm}^3, \quad (6.1.1)$$

$$\beta = 454.3 \quad \text{MeV fm}^5, \quad (6.1.2)$$

$$\gamma = 162.6 \quad \text{MeV fm}^5, \quad (6.1.3)$$

während Moszkowski und Ehlers²⁰⁾ die Bindungsenergie von ^{208}Pb und den rms - Radius dieses Kernes sowie die Bindungsenergie von ^{16}O zur Bestimmung von α , β und γ heranziehen. Das führt zu

$$\alpha = 1244.4 \quad \text{MeV fm}^3, \quad (6.1.4)$$

$$\beta = 646.4 \quad \text{MeV fm}^5, \quad (6.1.5)$$

$$\gamma = 144.7 \quad \text{MeV fm}^5. \quad (6.1.6)$$

Unabhängig von diesen Festlegungen wollen wir zunächst die Abhängigkeit der Gleichgewichtswerte des Fermiimpulses, k_{∞} , und der Energie pro Nukleon in Kernmaterie, ϵ_{∞} , von den Potentialparametern untersuchen und feststellen,

in welchen Fällen das System wirklich sättigt. Hierbei lehnen wir uns an die Untersuchung von Myers und Swiatecki¹³⁾ im Zusammenhang mit der von ihnen verwendeten Seyler-Blanchard - Wechselwirkung an. Zwischen Fermiimpuls und Energie pro Teilchen, k_0 und e , besteht in Kernmaterie für die MDI - Wechselwirkung die sich aus (4.2.15) und (5.1.18) ergebende Beziehung

$$e = \frac{3}{5} \frac{\hbar^2}{2m} k_0^2 + \frac{k_0^3}{4\pi^2} \left[-\alpha + \left(\frac{3}{10} \beta + \gamma \right) k_0^2 \right]. \quad (6.1.7)$$

Zwischen k_0 und n_0 besteht nach (5.2.3) der Zusammenhang

$$k_0 = \left(\frac{3\pi^2 n_0}{2} \right)^{1/3}. \quad (6.1.8)$$

Wir definieren nun folgende Hilfsgrößen:

$$\tilde{k}_0 = k_0 \left(\frac{\delta}{\alpha} \right)^{1/2}, \quad (6.1.9)$$

$$T = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\alpha}{\delta}, \quad (6.1.10)$$

$$\lambda = \alpha^{5/2} (4\pi^2 \delta^{3/2} T)^{-1}, \quad (6.1.11)$$

wobei
$$\delta = \frac{3}{10} \beta + \gamma. \quad (6.1.12)$$

Dann ist

$$e = \left[\frac{3}{5} \tilde{k}_0^2 - \lambda \tilde{k}_0^3 (1 - \tilde{k}_0^2) \right] T. \quad (6.1.13)$$

Es soll nun untersucht werden, in welchem Wertebereich von λ die Wechselwirkung (5.1.1/3) zur Sättigung führt.

In Fig. 2 haben wir die Abhängigkeit der Energie pro Nukleon vom "Fermiimpuls" $\tilde{k}_0$ für verschiedene Werte von λ dargestellt. Es ergibt sich eine Schar von Parabeln drit-

ten Grades, deren Extrema (falls vorhanden) durch die reellen Wurzeln der Gleichung

$$\frac{6}{5} \tilde{k}_0 - 3\lambda \tilde{k}_0^2 + 5\lambda \tilde{k}_0^4 = 0 \quad (6.1.14)$$

bestimmt werden. Die vorhandenen Minima charakterisieren hierbei die (stabilen) Gleichgewichtswerte des "Fermiimpulses" und der Energie pro Teilchen in Kernmaterie, $\tilde{k}_{\infty 0}$ und e_{∞} . Eine Lösung von (6.1.14) ist $\tilde{k}_{\infty 0} = 0$. Zwei weitere reelle positive Wurzeln ergeben sich, falls

$$\lambda^2 \geq \frac{9}{5}, \quad (6.1.15)$$

("casus irreducibilis").

In diesem Falle gilt

$$\tilde{k}_{\infty 0}^{1,2} = \frac{1}{\sqrt{5}} (\cos \vartheta \pm \sqrt{3} \sin \vartheta), \quad (6.1.16)$$

mit

$$\vartheta = \frac{1}{3} \arccos \frac{3}{\sqrt{5}\lambda}. \quad (6.1.17)$$

Gilt in (6.1.15) das Gleichheitszeichen, so fallen $\tilde{k}_{\infty 0}^1$ und $\tilde{k}_{\infty 0}^2$ zusammen. Für

$$\lambda^2 < \frac{9}{5} \quad (6.1.18)$$

gibt es für positive Werte von $\tilde{k}_0$ ausser $\tilde{k}_{\infty 0} = 0$ keine weiteren Nullstellen von (6.1.14).

Drückt man in (6.1.14) λ durch den Gleichgewichtswert $\tilde{k}_{\infty 0}$ aus, so erhält man

$$\lambda = \frac{6}{15 \tilde{k}_{\infty 0} \left(1 - \frac{5}{3} \tilde{k}_{\infty 0}^2\right)}. \quad (6.1.19)$$

Aus (6.1.19) und (6.1.13) ergibt sich der zu $\tilde{k}_{\omega_0}$ gehörenden Gleichgewichtswert der Energie pro Teilchen:

$$e_{\infty} = \frac{\tilde{k}_{\omega_0}^2 (1 - 3\tilde{k}_{\omega_0}^2) T}{5 (1 - \frac{3}{5} \tilde{k}_{\omega_0}^2)} . \quad (6.1.20)$$

Aus (6.1.15) und (6.1.19) in Verbindung mit (6.1.20) folgt, dass für

$$\lambda_c < \lambda < \lambda_0 , \quad (6.1.21)$$

mit

$$\lambda_c = \frac{3}{5} \sqrt{5} , \quad (6.1.22)$$

$$\lambda_0 = \frac{9}{10} \sqrt{3} , \quad (6.1.23)$$

der Gleichgewichtswert e_{∞} der Energie pro Teilchen positiv ist. In diesem Bereich gibt es für ein endliches Nukleonsystem keine stabile Bindung, da dieses - im Gegensatz zu einem unendlich ausgedehnt gedachten - durch Dissipation in das umgebende Vakuum in einen Zustand niedrigerer Energie übergehen würde. Erst für

$$\lambda > \lambda_0 . \quad (6.1.24)$$

ist hier eine stabile Bindung möglich, da in diesem Fall e_{∞} negativ wird.

Seien λ^{nm} , $\tilde{k}_{\omega_0}^{nm}$ die Werte, die aus den empirischen Kernmaterie - Daten für $k_{\omega_0}^{nm}$ und e_{∞}^{nm} mit Hilfe der aus (6.1.20) und (6.1.9/10) hergeleiteten Beziehungen

$$\tilde{k}_{\omega_0}^2 = \frac{1 - 5 \frac{e_{\infty}^{nm}}{T \tilde{k}_{\omega_0}^2}}{3 - \frac{25}{3} \frac{e_{\infty}^{nm}}{T \tilde{k}_{\omega_0}^2}} \quad (6.1.25)$$

und

$$\frac{\tilde{k}_{\omega_0}^2}{2\omega} = T \tilde{k}_{\omega_0}^2 \quad (6.1.26)$$

in Verbindung mit Gl. (6.1.19) berechnet werden können.

In Abb. 3 wurde $\tilde{k}_{\infty 0}$ als Funktion des Bindungsparameters λ dargestellt. Lassen wir λ gegen unendlich gehen, so geht $\tilde{k}_{\infty 0}$ gegen seinen asymptotischen Wert $\tilde{k}_{\infty 0}^{\text{as}} = (3/5)^{1/2}$. Man bemerkt, dass die Differenz von $\tilde{k}_{\infty 0}^{\text{nm}}$ und $\tilde{k}_{\infty 0}^{\text{as}}$ geringer ist, als die von $\tilde{k}_{\infty 0}^{\text{c}}$ und $\tilde{k}_{\infty 0}^{\text{nm}}$. Grosse Kerne sind also in diesem Sinn (sieht man von Coulomb-Abstossung und Kompressionseffekten ab) ideal gebundenen Systemen ($\lambda \rightarrow \infty$) ähnlicher als kritischen ($\lambda = \lambda_c$). Dies steht auch in Einklang mit den Ergebnissen von Myers und Swiatecki.¹³⁾

Durch eine kurze Rechnung wird der Zusammenhang der Gleichgewichtswerte von Fermiimpuls $k_{\infty 0}$ und Energie pro Teilchen e_{∞} mit den Potentialparameter α , β und γ hergestellt. Wir erhalten:

$$\alpha = -\frac{6}{5} \pi^2 \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{k_{\infty 0}} \left(3 - \frac{25}{3} \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e_{\infty}}{k_{\infty 0}^2} \right), \quad (6.1.27)$$

$$\frac{3}{10} \beta + \gamma = \frac{6}{5} \pi^2 \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{k_{\infty 0}^3} \left(1 - 5 \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e_{\infty}}{k_{\infty 0}^2} \right). \quad (6.1.28)$$

In (6.1.27/28) wird ausser α nur die Summe von $(\frac{3}{10} \beta + \gamma)$ durch Vorgabe der Kernmateriewerte von e_{∞} und $k_{\infty 0}$ eindeutig bestimmt. Um β und γ einzeln festzulegen, kann man als dritte Grösse die Oberflächenenergie der semiinfiniten Kernmaterie vorgeben.

6.2 Numerische Behandlung des Hartree - Fock - Problems der semiinfiniten Kernmaterie

Wir wollen das semiinfinite HF - Problem numerisch im Sinne des in Anhang 1 begründeten Ritzschen Variationsverfahrens lösen. Hierbei gehen wir zur Behandlung des semiinfiniten Problems (vgl. 4.6) von den Lösungen einer Einteilchen - Schrödinger - Gleichung mit einem parametrisierten "Vergleichspotential" U_a gemäss 4.4c aus, die wir zur Dichtematrix aufsummieren. Hiermit berechnen wir die MDI - Energie- und Teilchendichte und bilden den Oberflächenenergiekoeffizienten $\sigma_{n_0, a}$. Nehmen wir an, dass es einen Satz α_∞ von Variablen gibt, für den dieses Vergleichspotential U_a gerade in das selbstkonsistente semiinfinite HF - Potential übergeht.

In Anhang 1 ist bewiesen, dass die Oberflächenspannung für diesen Parametersatz und für $n_0 = n_{\infty 0}$ extremal ist. Für α_∞ und $n_{\infty 0}$ ergeben sich somit die Bestimmungsgleichungen: ⁺⁾

$$\frac{\partial \sigma_{n_{\infty 0}, \alpha_\infty}}{\partial n_{\infty 0}} = 0, \quad (6.2.1)$$

$$\frac{\partial \sigma_{n_{\infty 0}, \alpha_\infty}}{\partial \alpha_\infty} = 0. \quad (6.2.2)$$

Für die praktischen Rechnungen verwendet man dabei in der Einteilchen - Schrödingergleichung zur Erzeugung der Wellen-

⁺⁾ In (6.2.1) kann die Differentiation nach $n_{\infty 0}$ auch durch eine solche nach $k_{\infty 0}$ ersetzt werden.
(vgl. (6.1.8))

funktionen statt eines nichtlokalen Potentialansatzes vielfach ein lokales Potential mit wenigen freien Parametern, mit denen man im semiinfiniten Fall die Oberflächenenergie minimalisiert. W.J. Swiatecki³⁾ verwendete hierfür ein Rumpenpotential, Tabákin und Amos¹⁰⁾ haben gezeigt, dass die mit einem solchen Ansatz berechnete Oberflächenenergie der semiinfiniten Verteilung bereits eine sehr gute Näherung für die exakte HF - Oberflächenenergie darstellen kann.

Als Potentialansatz in diesem Sinne verwenden wir ein lokales Wood - Saxon - Potential

$$U_a(z) = U_0 \frac{1}{1 + e^{z/a}}, \quad U_0 < 0. \quad (6.2.3)$$

$U_a(z)$ enthält die beiden freien Parameter U_0 und a . U_0 gibt den asymptotischen Wert des Potentials im Inneren der semiinfiniten Verteilung an ($z \rightarrow -\infty$), a charakterisiert die Abfalleigenschaften von $U_a(z)$ in der Oberfläche. Die Wellenfunktionen ergeben sich dann als Lösungen der lokalen Schrödingergleichung

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left(k_z^2 - \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \varphi_E(z) + U_a(z) \varphi_E(z) = \varepsilon \varphi_E(z), \quad (6.2.4)$$

mit

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + U_0. \quad (6.2.5)$$

Wie Moszkowski und Ehlers²⁰⁾ setzen wir für den Kernmateriewert der Energie pro Teilchen und den Fermimpuls

$$\hbar k_0 = 1.33 \text{ fm}^{-1}, \quad (6.2.6)$$

$$\varepsilon_0 = -16.46 \text{ MeV} \quad (6.2.7)$$

an.

Dies ergibt nach Gleichung (6.1.27) und (6.1.28) für die Potentialparameter die Werte

$$\alpha = 1244.4 \text{ MeV fm}^3, \quad (6.2.8)$$

$$\frac{3}{10} \beta + \gamma = 338.62 \text{ MeV fm}^5. \quad (6.2.9)$$

Da die MDI - Wechselwirkung das Hugenholtz - van Hove Theorem⁷⁷⁾ erfüllt, (vgl. 3.6), wählen wir:

$$U_0 = e_\infty - \frac{\hbar^2 k_{\infty}^2}{2m} \cdot \left(\frac{\hbar^2}{2m} = 20.7336 \text{ MeV fm}^2 \right)^{33)} \quad (6.2.10)$$

Mit Hilfe einiger Umformungen³³⁾ kann (6.2.4) in eine Differentialgleichung vom hypergeometrischen Typ überführt werden. Für deren Lösung sowie für die anschliessende Aufsummation der Wellenfunktionen zur Dichtematrix bedienen wir uns eines Rechenprogramms, das Herr S. Knaak uns liebenswürdigerweise zur Verfügung stellte. Mit ihm werden die Teilchendichten $n(z)$ und kinetischen Energiedichten $\frac{1}{4} \nabla^2 n(z) - \tau(z)$ mit einer Genauigkeit bis zu fünf Dezimalen berechnet.

Für die numerische Bildung der ersten Ableitung der Teilchendichte verwenden wir eine fünf - Punkte - Differenzformel.¹¹¹⁾

Aus $n(z)$, $n'(z)$ und $\tau(z)$ ergibt sich die MDI - Energiedichte nach (5.1.18). Die semiinfiniten Dichten $n(z)$, $\tau(z)$ u.s.w. hängen mit $\hat{n}(s)$, $\hat{\tau}(s)$ u.s.w. (vgl. 5.3) über die Beziehungen

$$n(z) = \hat{n}(s) = \hat{n}(z-z_0), \tau(z) = \hat{\tau}(s) = \hat{\tau}(z-z_0) \text{ u.s.w.} \quad (6.2.11)$$

zusammen.

Hierbei ist z_0 durch Gl. (4.3.11)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dz [\hat{n}(z-z_0) - n_0 \theta(z_0-z)] = 0 \quad (6.2.12)$$

definiert. Es ergibt sich:

$$z_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \left[\frac{n(z)}{n_0} - \theta(-z) \right]. \quad (6.2.13)$$

Die für die Berechnung von Oberflächen- und Krümmungsenergien notwendigen Integrationen führen wir nach der Simpson-Regel in einem Bereich von -9 fm bis +4 fm mit einer gleichbleibenden Schrittweite von etwa 0.13 fm durch. Hierbei wählen wir Werte des Nichtlokalitätsparameters β zwischen 450 MeV fm⁵ und 950 MeV fm⁵.

Zu jedem β wird die Oberflächenspannung $\zeta_{k_0, \alpha}$ (vgl. 5.3) für eine Reihe von Werten des Wood - Saxon - Parameters a zwischen 0.5 fm und 0.9 fm ausgerechnet und das Extremum der Funktion $\zeta_{k_0, \alpha}$ gemäss Gleichung (6.2.2) bestimmt.

Für die Potentialparameter (6.1.4/5/6) sowie für den zugehörigen, ζ minimalisierenden Wood - Saxon - Parameter a_∞ , bestimmen wir dann ζ_{k_0, a_∞} für verschiedene Fermimpulse k_0 zwischen 1.22 fm⁻¹ und 1.44 fm⁻¹ und ermitteln das Extremum der Funktion ζ_{k_0, a_∞} (vgl. (6.2.1)).

Zur Berechnung der Krümmungsenergien ersetzen wir in (5.1.18) $\mathcal{E}$ nach (5.3.7) durch

$$\mathcal{E}^{\text{TFW}} = \frac{3}{5} \left(\frac{3\pi^2}{2} \right)^{2/3} n^{5/3} + \phi \frac{1}{4} \frac{(\nabla n)^2}{n}, \quad (6.2.14)$$

und ermitteln die sich so ergebenden Oberflächen- und Krümmungsspannungen gemäss 5.3 als Funktionen des Nicht-lokalitätsparameters β für verschiedene Werte des Weizsäckerfaktors ϕ .

Die numerischen Rechnungen wurden an der IBM 360/91 des Instituts für Plasmaphysik in Garching durchgeführt.

7. Ergebnisse

7.1 Oberflächenenergie

In Abb. 6 ist der Oberflächenenergiekoeffizient $\beta_c = 4\pi r_0^2 \epsilon_\infty$ als Funktion des Nichtlokalitätsparameters β aufgetragen. Die Summe $\frac{3}{10} \beta + \gamma$ wurde bei allen Rechnungen konstant gelassen (vgl. (6.2.9)). Die sich ergebenden Werte sind bezüglich des Wood - Saxon - Parameters a minimalisiert. Es ergibt sich in dem betrachteten Bereich ein fast linearer Zusammenhang zwischen der Grösse von β und dem Oberflächenenergiekoeffizienten.

In Abb. 7 haben wir die Abhängigkeit des $\epsilon_{\mu_0, a}$ minimalisierenden a_∞ von β dargestellt. a_∞ ist ein Maß für die Breite der Oberflächenzone.⁺⁾ Offensichtlich wächst diese ebenso wie die Oberflächenenergie ungefähr linear mit dem Nichtlokalitätsparameter β an. Bei gleichbleibenden Kernmateriewerten führt ein auf Kosten der Dichteabhängigkeit des Potentials stärker werdender Einfluss der Nichtlokalität bzw. der Impulsabhängigkeit zur Ausbildung einer breiteren Oberflächenzone. Dieselbe qualitative Beobachtung macht auch H.S. Köhler¹¹³⁾. -

In Abb. 3 ist die Teilchendichte für $a = 0.7$ fm und $U_0 = -53.13$ MeV dargestellt. Für $a = 0.693$ fm er-

⁺⁾ Definitionen der Breite der Oberflächenzone t einer leptodermen Dichteverteilung finden sich bei G. Süßmann^{80, 112)}. Es ergibt sich bei dem von uns verwendeten Wood-Saxon-Potential, dass t etwa linear mit a_∞ anwächst.

gibt sich mit den MDI - Parametern (6.1.4/5/6) ein Minimum der Oberflächenspannung.

Wir überprüfen numerisch die Gültigkeit des im Anhang 1 bewiesenen Theorems, nach dem die Oberflächenspannung $\tilde{\sigma}_{k_0, \alpha_\infty}$ der semiinfiniten Kernmaterie für den Sättigungswert des Fermiimpulses k_{ω_0} in HF-Rechnung extremal ist. In Abb. 5 wird $\tilde{\sigma}_{k_0, \alpha_\infty}$ in Abhängigkeit von k_0 dargestellt. Es ergibt sich, das $\tilde{\sigma}_{k_0, \alpha_\infty}$ für k_{ω_0} in sehr guter Näherung seinen maximalen Wert erreicht. Dies steht in Einklang mit den Ergebnissen der TF-Rechnungen von Myers u. Swiatecki¹³⁾ Auch diese Autoren stellen bei einer numerischen Überprüfung der von ihnen bewiesenen Stationaritätsaussage (6.2.1) fest, dass die erste Ableitung der Oberflächenspannung nach k_0 für $k_0 = k_{\omega_0}$ verschwindet und die zweite Ableitung an dieser Stelle negativ wird.

In Abb. 10 haben wir die HF - Dichte τ sowie $\tau^{\text{TFW}}(\varnothing=0)$ und $\tau^{\text{TFW}}(\varnothing = 1/9)^{+})$ aufgetragen. Man erkennt, dass bereits $\tau^{\text{TFW}}(\varnothing=0)$ eine recht gute Näherung für τ darstellt. Durch Hinzunahme einer Weizsäcker-Gradientenkorrektur ist natürlich keine punktweise, sondern höchstens eine "integrale" Übereinstimmung zu erreichen. Immerhin geht diese Korrektur für kleine Werte von τ in die richtige Richtung, wie man an dem Verlauf von $\tau^{\text{TFW}}(\varnothing=1/9)$ erkennen

^{+) $\varnothing = 1/9$ ist der Wert von Kirzhnits⁹³⁾}

kann. Für großes τ werden die Verhältnisse dagegen etwas ungünstiger, allerdings in einem sehr schwachen, in unserer Abb. 10 kaum erkennbaren Maße.

Mit $\gamma^{\text{TFW}}(\phi=0)$ und $\gamma^{\text{TFW}}(\phi=1/9)$ ergeben sich Oberflächenspannungen $\sigma^{\text{TFW}}(\phi=0)$ und $\sigma^{\text{TFW}}(\phi=1/9)$, deren Abhängigkeit von β ebenfalls in Abb. 6 dargestellt ist. Für den Fermiimpuls wurde der Sättigungs-, für a der $\epsilon_{\text{h.o.},a}$ minimalisierende Wert verwendet. In Abb. 8 wurde der Wert $\phi = \phi_{\infty}$ in Abhängigkeit von β aufgetragen, für den gerade

$$\sigma^{\text{TFW}}(\phi_{\infty}) = \sigma_{\infty} . \quad (7.1.3)$$

Für wachsendes β , also zunehmende Verbreiterung der Oberflächenzone, beobachtet man ein Abnehmen des Weizsäcker-Faktors ϕ_{∞} von 82 % ($\beta = 500 \text{ MeV fm}^5$) auf 44 % ($\beta = 900 \text{ MeV fm}^5$) des Wertes von Kirzhnits. Dies entspricht möglicherweise der Tatsache, dass das Kriterium (5.2.9) bei wachsender Ausdehnung der Oberfläche wegen der damit verbundenen Abnahme von ∇n immer besser erfüllt ist, die TF - Ergebnisse also umso geringere Korrekturen (Weizsäcker - Term!) bedürfen, um in Übereinstimmung mit den exakten HF-Werten zu gelangen.

$\sigma^{\text{TFW}}(\phi=0)$ entspricht nämlich etwa der TF - Näherung für die Oberflächenspannung bis auf die Tatsache, dass wir dem TF - Energie - Dichtefunktional nicht die TF- sondern die HF - Teilchendichte zugrundelegen. - Zwischen $\sigma^{\text{TFW}}(\phi=0)$ und σ_{∞} ergeben sich ($\beta \sim 450 \text{ MeV fm}^5$) Unterschiede von etwa 10 %, während S. A. Moszkowski¹⁷⁾ bei einem Vergleich

von HF- und TF - Werten der Oberflächenspannung Differenzen von 20 % erhält. Dies zeigt, dass schon das Ersetzen der TF - durch die HF - Teilchendichte im TF - Energie - Dichtefunktional (ohne Weizsäcker - Korrektur) die Übereinstimmung der Ergebnisse mit denen der HF - Theorie wesentlich verbessert.

7.2 Krümmungs- und Kompressionsenergie

In Abb. 9 werden die sich gemäss Kap. 4 ergebenden Werte für $\gamma_c \text{ curv}$ und $\gamma_c \text{ comp}$ dargestellt. Als kinetische Energiedichte legen wir dabei die rechte Seite von Gl. (5.3.7) zugrunde, wobei wir für den Weizsäckerfaktor ϕ denjenigen Wert verwenden, der gerade die HF - Oberflächenspannung G_∞ reproduziert. - Gleichzeitig werden auch diejenigen Krümmungskoeffizienten dargestellt, die sich mit $\phi = 0$ (verschwindender Weizsäckerkorrektur) und $\phi = \frac{1}{9}$ (Wert von Kirzhnits)⁹³⁾ ergeben.

In dem betrachteten Wertebereich von β liegt $\gamma_c \text{ curv}$ zwischen diesen beiden Kurven, wobei es mit wachsendem β (wachsender Ausdehnung der Kernoberfläche, vgl. Abb. 7) fast linear ansteigt und sich dabei immer mehr dem Wert für $\phi=0$ annähert. - (vgl. die Bemerkungen in 7.1 über die Gültigkeit der Thomas- Fermi - Näherung in der Kernoberfläche).

Der Kompressionsanteil- $\gamma_c \text{ comp}$ steigt dagegen schwach parabolisch mit wachsendem β an; er ist nach (4.3.32) dem Quadrat der Oberflächenspannung proportional. Sein Beitrag zum gesamten $A^{1/3}$ - Koeffizienten γ_c beträgt aber nur etwa 1/5 von $\gamma_c \text{ curv}$.

Für $\beta = 646.4 \text{ MeV fm}^5$ (Ehlers - Moszkowski)²⁰⁾ ergibt sich für $\gamma_c \text{ curv}$ ein Wert von 12.2 MeV. Mit $\gamma_c \text{ comp} = -2.9 \text{ MeV}$ erhalten wir gemäss (4.3.30) insgesamt: $\gamma_c = 9.3 \text{ MeV}$.

Dieses Ergebnis ist insbesondere mit den kurz vor Beendigung dieser Arbeit zur Veröffentlichung gelangten Werten von M. Dworzecka und S.A. Moszkowski³⁶⁾ zu vergleichen. - Diese Autoren versuchen, den gesamten $A^{1/3}$ - Term durch die HF-Berechnung der Bindungsenergien einer Reihe endlicher Kerne zu bestimmen (vgl. die abschliessende Bemerkung in 4.3). Dabei benutzen sie die von Moszkowski¹⁷⁾ entwickelte MDI - Wechselwirkung mit den Parametern (6.1.4/5/6). Indem sie geeignet über Schaleneffekte mitteln, erhalten sie eine Massenformel

$$\overline{F}_{HF}(A) = \left[(E/A)_{HF} - e_{\infty} \right] A^{1/3} = \beta_c + \gamma_c A^{-1/3} \quad (7.2.1)$$

Die auf diese Weise bestimmten Werte von β_c und γ_c hängen jedoch vom Wertebereich der Massenzahl A ab, in dem die Mittelungsprozedur durchgeführt wird. Für $A = 16 \dots 400$ ergibt sich $\beta_c = 21.67$ MeV, $\gamma_c = 5.2$ MeV; für $A = 30 \dots 260$ resultiert $\beta_c = 21.42$ MeV, $\gamma_c = 6.7$ MeV.

Die beträchtlichen Unterschiede in den Krümmungsenergiekoeffizienten rühren vermutlich daher, dass im Bereich $A = 16 \dots 50$ die Schalenfluktuationen etwa 10 mal grösser sind als zwischen $A = 300 \dots 400$. Würde man den kleinsten Wert von A, der in das Mittelungsverfahren mit einbezogen wird, grösser wählen (und natürlich die obere Grenze von A noch weiter heraufsetzen), so würde sich die Unsicherheit der Mittelungsprozedur verringern, da die durch Schaleneffekte hervorgerufenen Fluktuationen dann nicht mehr so stark ins Gewicht fallen. - Es sei darum noch bemerkt,

dass sich für den Bereich $A = 30 \dots 400$ aus Fig. 1 jener Arbeit für γ_c ein Wert von 8-9 MeV zu ergeben scheint, was den von uns angegebenen 9.3 MeV recht nahe kommt.

In diesem Zusammenhang sei auf die Arbeiten von Negele und Vautherin⁴⁰⁾ hingewiesen, die in einem ähnlichen Verfahren wie Dworzecka und Moszkowski unter Verwendung des Reid - Potentials¹¹⁷⁾ für γ_c einen Wert von 11.9 MeV angeben. Diese Autoren⁴⁰⁾ stellen fest, dass ihr Ergebnis durch das Hinzufügen einer Spin - Bahn - Kraft nahezu unbeeinflusst bleibt.

Dworzecka und Moszkowski³⁶⁾ stellen dann noch Energie-Dichteformalismus - Rechnungen an, um die erhaltenen HF - Ergebnisse hiermit zu vergleichen. Ihr Ansatz für das Energie-Dichtefunktional hat allerdings keine direkte Beziehung zu der in der HF - Rechnung verwendeten MDI - Wechselwirkung, sondern er basiert auf einem älteren Kernmateriemodell von Skyrme¹¹⁴⁾. Die beiden Autoren verwenden als Ansatz für die Teilchendichte eine Fermi - Verteilung:

$$n(r) = n_0 \left(1 + e^{(r-R)/a} \right)^{-1}, \quad (7.2.2)$$

mit den Variationsparametern n_0 und a und extrahieren aus dem hiermit gebildeten Ausdruck für die Bindungsenergie Oberflächen- und Krümmungsterme, indem sie E/A nach Potenzen von a/R entwickeln. Sodann passen sie die Parameter ihres Energie- Dichtefunktional an die HF - Volumen- und Oberflächenenergien an.

Sie erhalten so zwar gute Übereinstimmung mit den HF-Werten der Krümmungsenergiekoeffizienten, jedoch um ca. 10 % zu niedrige Kernmittelpunktsdichten n_{A_0} im Bereich $A = 100$. Es ergibt sich also statt einer Komprimierung des Kerninneren durch die Oberflächenenergie in diesem Bereich einen schwer verständlichen Abfall der Teilchendichte als $A^{-2/3}$ -Effekt. - Dworzecka und Moszkowski vermuten selbst, dass dies an dem von ihnen verwendeten Fermifunktionsansatz (7.2.2) liegt, den sie deshalb gewählt haben, weil die Ausdrücke für die Gesamtenergie, die sich mit ihm ergeben, besonders leicht nach Potenzen von $A^{1/3}$ entwickelt werden können. Tatsächlich erhalten diese Autoren unter Verwendung von anderen Ansätzen für die Teilchendichte - mit denen sie allerdings keine Krümmungsenergien berechnen können - bei endlichen Kernen sogar einen Anstieg der Kernmittelpunktsdichte über den Kernmateriewert.

Da der erste Term der Entwicklung von n_{A_0} nach Potenzen von $A^{-1/3}$ positiv ist (vgl. (4.3.25)), ist für grosse Kerne grundsätzlich ein Anwachsen von n_{A_0} über den Kernmateriewert zu erwarten. Gl. (4.3.25) ist eine Konsequenz der Tatsache, dass der semiinfinite Oberflächenkoeffizient σ_∞ bezüglich Variationen der Kernmaterie - Teilchendichte um ihren Gleichgewichtswert n_∞ stationär ist (vgl. (6.2.1)), was für Hartree - Fock - Systeme mit sättigender Wechselwirkung im Anhang 1 explizit bewiesen und auch numerisch (Abb. 5) bestätigt wurde. In Verbindung mit dem fundamentalen Satz von Hohenberg und Kohn ist diese Variationsaussage

eine direkte Konsequenz des Theorems von Myers und Swiatecki¹³⁾, das für leptoderme Gleichgewichtsverteilungen, bei denen ein grosser Volumenbereich mit konstanter Dichte von einem kleinen Oberflächenbereich unterschieden werden kann, allgemein gültig ist, und von ihnen für eine spezielle Wechselwirkung auch numerisch getestet wurde. Legt man jedoch bei der Entwicklung von n_A nach Potenzen von $A^{-1/3}$ eine Teilchendichte zugrunde, die vom exakten Gleichgewichtsverlauf abweicht - etwa den von Dworzecka und Moszkowski verwendeten Fermifunktionsansatz - , so braucht dieses Theorem nicht erfüllt zu sein und n'_{∞} wird möglicherweise negativ.

Bei S. Knaak²⁶⁾ wird dieses Theorem ebenfalls nicht berücksichtigt. Hier ist der Effekt des Dichteabfalls bei endlichen Kernen gegenüber dem Kernmateriewert noch wesentlich stärker ausgeprägt als bei Dworzecka und Moszkowski: Bei $A = 100$ beträgt er ca. 45 %, bei $A = 500$ immer noch etwa 30 %. Dies hat zur Folge, dass der Beitrag des Kompressionsanteils zum $A^{1/3}$ - Term der Massenformel $\gamma_c \text{ comp}$, die sich in dieser Arbeit sowie in denen von Myers und Swiatecki¹³⁾ und Stocker³⁴⁾ ergebenden Werte um etwa eine Grössenordnung übertrifft und γ_c für Werte von $K < 232$ MeV sogar negativ werden lässt.

Ohne diesen Kompressionsbeitrag läge γ_c nach den Ergebnissen von S. Knaak bei etwa 40 MeV; dies ist der reine Krümmungsterm, den er in einem HF - ähnlichen Verfahren dadurch herauszupräparieren versucht, dass er die volle Dichtematrix des sphärischen Kernes, die er nach phänomenologischen Kri-

terien aus derjenigen der semiinfiniten Kernmaterie konstruiert, nach Potenzen des reziproken Krümmungsradius entwickelt. -

Es soll noch erwähnt werden, dass das Stationaritätstheorem von Myers und Swiatecki¹³⁾, das auch W. Stocker³⁴⁾ seiner Arbeit zugrundelegt, von Bennett und Ravenhall³⁵⁾ in ihrer TF - Rechnung auf unabhängigem Wege bestätigt wurde.

8 Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wird eine mikroskopische Begründung des $A^{1/3}$ - Terms der auf C.F. v. Weizsäcker¹⁾ zurückgehenden Entwicklung

$$E_A = \alpha_c A + \beta_c A^{2/3} + \gamma_c A^{1/3} \dots \quad (8.1)$$

der Bindungsenergie E_A der Atomkerne nach der Massenzahl A angestellt.

Hierbei gehen wir von einer effektiven dichte- und impulsabhängigen Kontaktwechselwirkung (MDI) zwischen den Nukleonen aus, die von Moszkowski¹⁷⁾ vorgeschlagen wurde und die vermutlich eine gute Näherung für die fundamentale K - Matrix der Brueckner - Theorie darstellt. Eine solche Wechselwirkung hat sättigenden Charakter: Die sich mit ihr ergebende Teilchendichte n_A in grossen Kernen sollte dann in einem ausgedehnten Innenbereich einen näherungsweise konstanten Wert n_{A0} besitzen und in einem dünnen Oberflächenbereich exponentiell auf Null abfallen (leptodermes System).

Ein ähnliches Verhalten hat dann auch die Energiedichte η_A , deren Raumintegral die Bindungsenergie E_A ergibt. Diese kann dann als Summe von zwei Termen dargestellt werden, von denen der erste eine der Teilchenzahl A näherungsweise proportionale Volumenenergie, der zweite eine dem Quadrat des Kernradius, also etwa $A^{2/3}$ - proportionale Oberflächenenergie darstellt:

$$E_A = \alpha_A A + \beta_A A^{2/3} \quad (8.2)$$

γ_c ergibt sich nun aus den Entwicklungen

$$\alpha_A = e_A = e_\infty + e_\infty' A^{-1/3} + \frac{1}{2} e_\infty'' A^{-2/3}, \quad (8.3)$$

$$\beta_A = 4\pi r_A^2 \sigma_A = 4\pi (r_\infty^2 + r_\infty'^2 A^{-1/3}) (\sigma_\infty + \sigma_\infty' A^{-1/3}) \quad (8.4)$$

von α_A und β_A nach Potenzen von $A^{-1/3}$.

e_A ist hierbei die Energie pro Teilchen, r_A der Proportionalitätsfaktor zwischen Kernradius und $A^{1/3}$, σ_A die Oberflächenspannung. Eine Berechnung dieser Ausdrücke setzt die Kenntnis der Abhängigkeit der Energie- und Teilchendichte η_A und n_A von A voraus.

In Hartree - Fock - Theorie hängt infolge des Kontaktcharakters der verwendeten Wechselwirkung η_A nur noch von n_A und - als einzigem nichtdiagonalem Element der Einteilchendichtematrix - von der kinetischen Energiedichte τ_A ab.

Nach einem Theorem von P. Hohenberg und W. Kohn²²⁾ ist jedoch der gesamte HF - Vielteilchengrundzustand, also auch τ_A , durch die Vorgabe der Teilchendichte eindeutig bestimmt; ausserdem ist die Grundzustandsenergie als Funktional der Teilchendichte bezüglich Variationen von n_A unter Einhaltung gewisser Nebenbedingungen stationär.

Es ist somit möglich, τ_A durch eine Funktion von n_A zu ersetzen. η_A hängt dann nur noch von der lokalen Teilchendichte und deren Ableitungen ab. Allerdings ist die exakte Form von $\tau[n_A]$ nicht geschlossen angebar. Wir sind darum in dieser Hinsicht auf Näherungen angewiesen. Im Falle

sphärischer Kerne, auf den wir uns beschränken (die Coulomb - Energie denken wir uns abgeschaltet; zwischen Protonen und Neutronen wird nicht unterschieden) sind $\hat{\eta}_A(s)$ und $\hat{n}_A(s)$ als kugelsymmetrische Verteilungen nur vom radialen Abstand s von der Oberfläche abhängig.

Nach einem allgemeinen Satz von W.D. Myers und W.J. Swiatecki¹³⁾ ist dann die zu β_A bis auf $A^{-1/3}$ - Terme proportionale Oberflächenspannung $\bar{\sigma}_A$ für grosses A bezüglich Variationen des radialen Teilchendichteprofiles unter Einhaltung gewisser Nebenbedingungen stationär. (Ein analoges Theorem wurde im Anhang explizit für die Hartree - Fock - Methode bewiesen.)

In der Entwicklung (8.4) leistet darum die A - Abhängigkeit des Teilchendichteprofiles keinen Beitrag zu $\bar{\sigma}'_\infty$. Für die Berechnung von $\bar{\sigma}'_\infty$ brauchen hier also nur einfache geometrische Abhängigkeiten gewisser Integranden von der Kernkrümmung berücksichtigt zu werden. $4\pi r_\infty^2 \bar{\sigma}'_\infty$ hat dann die Bedeutung eines Krümmungsenergiekoeffizienten. Hingegen ist die $A^{-1/3}$ - Abhängigkeit von n_{A_0} im Zusammenhang mit der Entwicklung von e_A und r_A in (8.3/4) zu beachten. Die erwähnte Stationaritätsaussage von Myers und Swiatecki bzw. das in Anhang 1 bewiesene Theorem führt jedoch auch in diesem Falle zu einer Vereinfachung des Problems. Physikalisch ist der von r'_∞ und e''_∞ herrührende $A^{1/3}$ - Beitrag als Kompressionseffekt des homogenen Kerninneren durch die Oberflächenspannung zu interpretieren.

Es zeigt sich insgesamt, dass man sich für die Entwicklungen (8.3/4) von vorneherein auf die Berechnung von Teilchen- und Energiedichten in der Grenze der "semiinfiniten Kernmaterie" ($A \rightarrow \infty$) beschränken kann. Wir berechnen darum für diesen Fall zuerst den $A^{2/3}$ -Koeffizienten $\beta_\infty = \beta_c$ in Hartree - Fock - Rechnung nach einem Ritzschen Variationsverfahren und ersetzen sodann die kinetische Energiedichte τ durch den von C.F. v. Weizsäcker und vielen anderen Autoren verwendeten Ansatz

$$\tau^{TFW}(\phi) = \frac{3}{5} \left(\frac{3\pi^2}{2} \right)^{1/3} n^{5/3} + \phi \frac{1}{4} \frac{(\nabla n)^2}{n}, \quad (8.5)$$

wobei wir den Parameter ϕ an den HF - Wert von β_c anpassen. In dieser Weise ergibt sich für den Kompressionsbeitrag ein Wert von -2.9 MeV, während der reine Krümmungskoeffizient 12.2 MeV beträgt. Damit erhalten wir:

$$\gamma_c = 9.3 \text{ MeV.}$$

Dieses Ergebnis stimmt recht gut mit Hartree - Fock - Berechnungen der Bindungsenergien einer Reihe sehr grosser Kerne überein^{36,40}), wenn man berücksichtigt, dass die so gewonnenen Massenformel - Koeffizienten wegen der notwendigen Mittelungsprozedur über Schaleneffekte mit einem gewissen Unsicherheitsfaktor versehen sind.

Anhang 1 Stationaritätseigenschaften der Hartree - Fock - Oberflächenspannung

In 4.6 wurden die HF - Gleichungen der semiinfiniten Kern-
materie aufgestellt und einige Eigenschaften ihrer Lösungen
angegeben.

Im Sinne des Ritzschen Variationsverfahrens definieren wir
nunmehr Vergleichslösungen $\chi_a(k_\perp, k_z, z)$, die sich aus
einer zu (4.6.4) analogen Schrödingergleichung

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left(-\frac{\partial^2}{\partial z^2} + k_\perp^2 \right) \chi_a(k_\perp, k_z, z) + \int d^3\xi U_a \left[\left(z - \frac{1}{2}\xi_z \right) \vec{e}_z, \vec{\xi} \right] e^{-i\vec{k}_\perp \cdot \vec{\xi}_\perp} \cdot \\ \chi_a(k_\perp, k_z, z - \frac{1}{2}\xi_z) = \varepsilon_a(k) \chi_a(k_\perp, k_z, z) \quad (\text{A.1.1})$$

mit einem Vergleichs-Einteilchenpotential, $U_a(z\vec{e}_z, \vec{\xi})$ er-
geben, das für grosse negative z von dieser Koordinate un-
abhängig werden soll, so dass (A 1.1) Lösungen χ_a besitzt,
die das asymptotische Verhalten (4.6.12) und die
Normierungseigenschaften (4.6.13/14) aufweisen. Der Index a
steht für einen Parametersatz, der das "semiinfinite" Ein-
teilchenpotential U_a charakterisiert.<sup>+) k_0 sei ein Ver-
gleichs-Fermimpuls, bis zu dem die Wellenfunktionen χ_a
entsprechend (4.6.15) zur Dichtematrix</sup>

$$\tilde{n}_{k_0, a}(z\vec{e}_z, \vec{\xi}) = \frac{8}{(2\pi)^3} \int d^3k \, \Theta(k_0^2 - k^2) e^{i\vec{k}_\perp \cdot \vec{\xi}_\perp} \chi_a^*(k_\perp, k_z, z - \frac{1}{2}\xi_z) \cdot \\ \chi_a(k_\perp, k_z, z + \frac{1}{2}\xi_z). \quad (\text{A 1.2})$$

^{+) U_a sei eine stetig differenzierbare Funktion von a .}

aufsummiert werden. - Für einen bestimmten Parametersatz $a = a_\infty$ und für $k_0 = k_{\infty_0}$ sollen alle Vergleichsgrößen in ihre entsprechenden selbstkonsistenten HF-Werte übergehen:

$$\chi_{\alpha_\infty}(k_1, k_2, z) = \varphi(k_1, k_2, z), \quad \varepsilon_{\alpha_\infty}(k) = \varepsilon_\infty(k), \quad (A.1.3)$$

$$U_{\alpha_\infty}(z\vec{e}_z, \vec{\xi}) = U_\infty(z\vec{e}_z, \vec{\xi}) = \tilde{U}_\infty(z\vec{e}_z, \vec{\xi}) + U_\infty^R(z\vec{e}_z); \quad (A.1.4)$$

$$\tilde{n}_{k_{\infty_0}, \alpha_\infty}(z\vec{e}_z, \vec{\xi}) = \tilde{n}_\infty(z\vec{e}_z, \vec{\xi}). \quad (A.1.5)$$

Wir wollen nun beweisen, dass die mit der Dichtematrix

$\tilde{n}_{k_0, \alpha}(\vec{r}, \vec{\xi})$ gebildete Oberflächenspannung

$$\sigma_{k_0, \alpha} = \int_{-\infty}^{\infty} dz [\eta_{k_0, \alpha}(z) - e_{k_0} n_{k_0, \alpha}(z)], \quad (A.1.6)$$

mit

$$\begin{aligned} \eta_{k_0, \alpha}(z) = & -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_r^2 \tilde{n}_{k_0, \alpha}(\frac{\vec{r} + \vec{r}'}{2}, \vec{r} - \vec{r}') \Big|_{\vec{r}' = r} + \frac{1}{2} \int d^3r' d^3\xi \cdot \\ & \hat{U}[n_{k_0, \alpha}(\frac{z+z'}{2}\vec{e}_z), z\vec{e}_z - \vec{r}', \vec{\xi}] \tilde{n}_{k_0, \alpha}(z\vec{e}_z, \vec{\xi}) \tilde{n}_{k_0, \alpha}(z\vec{e}_z, -\vec{\xi}). \end{aligned} \quad (A.1.7)$$

(vgl. (3.6.28) bezüglich Variationen der Parameter k_0 und a um ihre HF - Werte k_{∞_0} und a_∞ stationär ist:

$$\left. \frac{\partial \sigma_{k_0, \alpha}}{\partial k_0} \right|_{\substack{k_0 = k_{\infty_0} \\ \alpha = \alpha_\infty}} = 0, \quad (A.1.8)$$

$$\left. \frac{\partial \sigma_{k_0, \alpha}}{\partial a} \right|_{\substack{k_0 = k_{\infty_0} \\ \alpha = \alpha_\infty}} = 0. \quad (A.1.9)$$

Gleichung (A 1.9) ist von S. Knaak für dichteunabhängige Zweiteilchenwechselwirkungen bewiesen worden. Der vorliegenden Arbeit bleibt es vorbehalten, die Gültigkeit von (A 1.8) und (A 1.9) für dichteabhängige (unter Berücksichtigung von Rearrangement-Termen) und dichteunabhängige Potentiale darzulegen.

Für den Beweis verabreden wir folgende Notation:

$$\frac{\partial}{\partial k_0, \partial a} \quad \text{bedeutet} \quad \left\{ \frac{\partial}{\partial k_0} \quad \text{oder} \quad \frac{\partial}{\partial a} \right\}. \quad (\text{A } 1.10)$$

Zunächst ist festzustellen, dass in

$$\frac{\partial}{\partial k_0, \partial a} \sigma_{k_0, a} = \frac{\partial}{\partial k_0, \partial a} \lim_{L \rightarrow \infty} \int_{-L}^{+L} dz \left[\eta_{k_0, a}(z) - e_{k_0} u_{k_0, a}(z) \right]. \quad (\text{A } 1.11)$$

die Differentiationen wegen des exponentiellen Abfalls von [...] für grosse positive, und des asymptotischen Abklingverhaltens³³⁾

$$[\dots] \sim \frac{\sin 2k_0 z}{(2k_0 z)^2} \quad (\text{A } 1.12)$$

(vgl. (4.6.12)) für grosse negative Werte von z mit dem $\lim_{L \rightarrow \infty}$ vertauschbar sind. Es ergibt sich darum mit (A 1.2) und (A 1.7):

$$\frac{\partial}{\partial k_0, \partial a} \sigma_{k_0, a} \Big|_{\substack{k_0 = k_{00} \\ a = a_0}} = \lim_{L \rightarrow \infty} (\tau_1^L + \tau_2^L + \tau_3^L + \tau_4^L + \tau_5^L), \quad (\text{A } 1.13)$$

mit

$$\begin{aligned} \tau_1^L &= \frac{g}{(2\pi)} k_0 \int_{-L}^{\infty} dz \int_{-k_0}^{+k_0} dk_z \int_0^{2\pi} d\varphi \left\{ \chi_a^* \left(\sqrt{k_0^2 - k_z^2}, k_z, z \right) \left[\frac{k_z^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} - k_0^2 - k_z^2 \right) - e_{k_0} \right] \right. \\ &\quad \left. \chi_a \left(\sqrt{k_0^2 - k_z^2}, k_z, z \right) + \int d^3\xi \tilde{U}_\infty \left(z \vec{e}_z, \vec{\xi} \right) e^{-i\sqrt{k_0^2 - k_z^2} \xi_z \cos \varphi} \chi_a^* \left(\sqrt{k_0^2 - k_z^2}, k_z, z + \frac{1}{2} \xi_z \right) \right. \\ &\quad \left. \chi_a \left(\sqrt{k_0^2 - k_z^2}, k_z, z - \frac{1}{2} \xi_z \right) \right\} \Big|_{\substack{k_0 = k_{00} \\ a = a_0}} \quad , \end{aligned} \quad (\text{A } 1.14)$$

$$\begin{aligned} \tau_2^L = & \frac{g}{(2\pi)^3} \int_{-L}^{\infty} dz \int_0^{k_0} dk \int_{-k}^{+k} dk_z \int_0^{2\pi} d\varphi \left\{ \frac{\partial}{\partial k_0, \partial a} \left\{ \chi_a^* (k_{\perp}, k_z, z) \right. \right. \\ & \left. \left[\frac{k^2}{2m} \left(-\frac{\partial^2}{\partial z^2} + k_{\perp}^2 \right) - \epsilon_{k_0} \right] \chi_a (k_{\perp}, k_z, z) \right\} + \int d^3 \xi \tilde{U}_{\infty} (z \vec{e}_z, \xi) \cdot \\ & e^{-ik_{\perp} \xi_{\perp} / \omega \varphi} \frac{\partial}{\partial a} \left\{ \chi_a^* (k_{\perp}, k_z, z + \frac{1}{2} \xi_z) \chi_a (k_{\perp}, k_z, z - \frac{1}{2} \xi_z) \right\} \Big|_{\substack{k_0 = k_{\omega 0} \\ a = a_{\omega 0}}} \right\}, \quad (A 1.15) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tau_3^L = & \int_{-L}^{\infty} dz \int d^3 r' \int d^3 \xi \hat{K} \left[n_{k_0, a} \left(\frac{z+z'}{2} \vec{e}_z, z \vec{e}_z - \vec{r}', 2 \xi \right) \left\{ \frac{\partial}{\partial k_0, \partial a} \tilde{U}_{k_0, a} (z \vec{e}_z, \xi) \right\} \cdot \right. \\ & \left. \tilde{U}_{k_0, a} (z \vec{e}_z, -\xi) \right] \Big|_{\substack{k_0 = k_{\omega 0} \\ a = a_{\omega 0}}} \quad (A 1.16) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tau_4^L = & \frac{1}{2} \int_{-L}^{\infty} dz \int d^3 r' \int d^3 \xi \left\{ \frac{\partial}{\partial k_0, \partial a} \hat{K} \left[n_{k_0, a} \left(\frac{z+z'}{2} \vec{e}_z, z \vec{e}_z - \vec{r}', 2 \xi \right) \right] \cdot \right. \\ & \left. \tilde{U}_{k_0, a} (z \vec{e}_z, \xi) \tilde{U}_{k_0, a} (z \vec{e}_z, -\xi) \right\} \Big|_{\substack{k_0 = k_{\omega 0} \\ a = a_{\omega 0}}} \quad (A 1.17) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tau_5^L = & -\frac{1}{2} \int_{-L}^{\infty} dz \int d^3 r' \int d^3 \xi \hat{K} \left[n_{k_0, a} \left(\frac{z+z'}{2} \vec{e}_z, z \vec{e}_z - \vec{r}', 2 \xi \right) \frac{\partial}{\partial k_0, \partial a} \left\{ \tilde{U}_{k_0, a} (z \vec{e}_z, \xi) \cdot \right. \right. \\ & \left. \left. \tilde{U}_{k_0, a} (z \vec{e}_z, -\xi) \right\} \right] \Big|_{\substack{k_0 = k_{\omega 0} \\ a = a_{\omega 0}}} \quad (A 1.18) \end{aligned}$$

τ_1^L tritt nur bei (A 1.8) auf, während die übrigen Terme sowohl bei (A 1.8), als auch bei (A 1.9) erscheinen.

3) Es ist

$$\begin{aligned} \tau_4^L = & \int_{-L}^{\infty} dz \left\{ \int_{-L}^{\infty} dz' + \int_{-\infty}^{-L} dz' \right\} \int d^2 r' \int d^3 \xi \frac{\partial \hat{K} \left[n_{k_0, a} (z' \vec{e}_z), 2 \left((z-z') \vec{e}_z - \vec{r}' \right), 2 \xi \right]}{\partial n_{k_0, a} (z' \vec{e}_z)} \cdot \\ & \tilde{U}_{k_0, a} \left((z-z') \vec{e}_z, \xi \right) \tilde{U}_{k_0, a} (z \vec{e}_z, -\xi) \frac{\partial}{\partial k_0, \partial a} n_{k_0, a} (z' \vec{e}_z) \Big|_{\substack{k_0 = k_{\omega 0} \\ a = a_{\omega 0}}} \quad (A 1.19) \end{aligned}$$

Andererseits gilt (vgl. (3.6.33)):

$$\int_{-L}^{\infty} dz U_{k_0, \alpha}^R(z\vec{e}_z) \frac{\partial}{\partial k_0, \partial \alpha} n_{k_0, \alpha}(z) = \int_{-L}^{\infty} dz \left\{ \int_{-L}^{\infty} dz' + \int_{-\infty}^{-L} dz' \right\} \left\{ \mathcal{A}_{\pm}^2 \int d^3\xi \right\} \cdot$$

$$\frac{\partial \hat{K} [n_{k_0, \alpha}(z\vec{e}_z), 2((z-z')\vec{e}_z - \vec{r}_\pm), 2\xi]}{\partial n_{k_0, \alpha}(z\vec{e}_z)} \cdot \tilde{n}_{k_0, \alpha}(z'\vec{e}_z, \xi) \cdot \tilde{n}_{k_0, \alpha}((z-z')\vec{e}_z, -\xi) \frac{\partial}{\partial k_0, \partial \alpha} n_{k_0, \alpha}(z\vec{e}_z).$$

(A 1.20)

Bildet man die Differenz der rechten Seiten von (A 1.19) und (A 1.20), so stellt man durch Vertauschung der Integrationskoordinaten z und z' fest, dass die $\int_{-L}^{\infty} dz \int_{-L}^{\infty} dz' -$ Integrale sich gegenseitig annullieren. Hierbei macht man von der Teilchenvertauschungsinvarianz von $\hat{K}$ Gebrauch (vgl. 3.1) und berücksichtigt die Relation (3.5.20). Die Differenz der $\int_{-L}^{\infty} dz \int_{-\infty}^{-L} dz' -$ Integrale verschwindet wegen der endlichen Reichweite der Kernkräfte und wegen der Tatsache, dass die Dichtematrix $\tilde{n}_{k_0, \alpha}(z\vec{e}_z, \xi)$ für grosse negative z von dieser Koordinate unabhängig wird. - Es ist also:

$$\tau_4^L = \int_{-L}^{\infty} dz U_{k_0, \alpha}^R(z\vec{e}_z) \frac{\partial}{\partial k_0, \partial \alpha} n_{k_0, \alpha}(z\vec{e}_z) \Big|_{\substack{k_0 = k_{00} \\ \alpha = \alpha_{00}}}.$$

(A 1.21)

Es folgt

$$\tau_4^L = \tau_{4,1}^L + \tau_{4,2}^L,$$

(A 1.22)

wobei

$$\tau_{4,1}^L = \int_{-L}^{\infty} dz U_{\infty}^R(z\vec{e}_z) \frac{8}{(2\pi)^3} k_0 \int_{-k_0}^{+k_0} dk_z \int_0^{2\pi} d\varphi \chi_{\alpha}^* (\sqrt{k_0^2 - k_z^2}, k_z, z) \cdot$$

$$\chi_{\alpha} (\sqrt{k_0^2 - k_z^2}, k_z, z) \Big|_{\substack{k_0 = k_{00} \\ \alpha = \alpha_{00}}}$$

(A 1.23)

$$\tau_{4,2}^L = \int_{-L}^{\infty} dz U_{\infty}^R(z\vec{e}_z) \frac{8}{(2\pi)^3} \int d^3k O(k_0^2 - k^2) \frac{\partial}{\partial \alpha} \left\{ \chi_{\alpha}^* (k_1, k_z, z) \chi_{\alpha} (k_1, k_z, z) \right\} \Big|_{\substack{k_0 = k_{00} \\ \alpha = \alpha_{00}}}.$$

(A 1.24)

$\tau_{4,1}^L$ tritt nur bei (A 1.8) auf.

Wir fassen γ_1^L und $\gamma_{4,1}^L$ sowie γ_2^L und $\gamma_{4,2}^L$ zusammen:

4) Es ist

$$\begin{aligned} \gamma_1^L + \gamma_{4,1}^L &= \frac{8}{(2\pi)^3} k_0 \int_{-L}^{\infty} dz \int_{-k_0}^{+k_0} dk_z \int_0^{2\pi} d\varphi \chi_a^* (\sqrt{k_0^2 - k_z^2}, k_z, z) \cdot \\ &\quad \left\{ \left[\frac{\hbar^2}{2m} \left(-\frac{\partial^2}{\partial z^2} + k_0^2 - k_z^2 \right) - e_{k_0} + U_\infty^R(z\vec{e}_z) \right] \cdot \chi_a (\sqrt{k_0^2 - k_z^2}, k_z, z) + \right. \\ &\quad \left. \int d^3\xi \tilde{U}_\infty \left[(z - \frac{1}{2}\xi_z) \vec{e}_z, \vec{\xi} \right] e^{i\sqrt{k_0^2 - k_z^2} \xi_z \cos \varphi} \chi_a (\sqrt{k_0^2 - k_z^2}, k_z, z - \xi_z) \right\} + \\ &\quad \frac{8}{(2\pi)^3} k_0 \int_{-L + \frac{1}{2}\xi_z}^{-L} dz \int_{-k_0}^{+k_0} dk_z \int_0^{2\pi} d\varphi \tilde{U}_\infty \left[(z - \frac{1}{2}\xi_z) \vec{e}_z, \vec{\xi} \right] e^{i\sqrt{k_0^2 - k_z^2} \xi_z \cos \varphi} \cdot \\ &\quad \chi_a^* (\sqrt{k_0^2 - k_z^2}, k_z, z) \chi_a (\sqrt{k_0^2 - k_z^2}, k_z, z - \xi_z) \Big|_{\substack{k_0 = k_{\infty_0} \\ u = u_{\infty}}} \quad (A 1.25) \end{aligned}$$

Nach dem Theorem von Hugenholtz und van Hove gilt:

$$e_{k_{\infty_0}} = e_\infty = \varepsilon_\infty(k_{\infty_0}). \quad (A 1.26)$$

$\varepsilon_\infty(k_{\infty_0})$ ist die Fermienergie.

Setzt man die rechte Seite von (A 1.26) in (A 1.25) ein, so stellt die geschweifte Klammer $\{ \dots \}$ gerade die HF - Gleichung des energiereichsten Teilchens dar. Die ersten drei Zeilen von (A 1.25) verschwinden also.

Für grosse L gilt unter Berücksichtigung des asymptotischen Verhaltens (4.6.12) der Wellenfunktionen:

$$\begin{aligned} \gamma_1^L + \gamma_{4,1}^L &= \frac{8}{(2\pi)^3} k_{\infty_0} \int_{-k_{\infty_0}}^{+k_{\infty_0}} dk_z \int_0^{2\pi} d\varphi \int d^3\xi \tilde{U}_\infty(\vec{\xi}) e^{i\sqrt{k_{\infty_0}^2 - k_z^2} \xi_z \cos \varphi} \cdot \\ &\quad \int_{-L + \frac{1}{2}\xi_z}^{-L} dz \left\{ \sin^2(-k_z z + \vartheta) \cos k_z \xi_z + \frac{1}{2} \sin(2(-k_z z + \vartheta)) \sin k_z \xi_z \right\}. \quad (A 1.27) \end{aligned}$$

Unter Benutzung der Distributionsgleichungen

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\sin(2k_z L)}{2k_z} = \pi \delta(2k_z), \quad (\text{A 1.28})$$

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \cos(2k_z L) = 0, \quad (\text{A 1.29})$$

erhalten wir :

$$\lim_{L \rightarrow \infty} (\tau_1^L + \tau_{4,1}^L) = -\frac{1}{4} \frac{8}{(2\pi)^3} k_{\infty 0} \int_{k_{\infty 0}}^{+k_{\infty 0}} dk_z \int_0^{2\pi} d\varphi \int d^3\xi \tilde{U}_{\infty}(\vec{\xi}) \cdot e^{i\sqrt{k_{\infty 0}^2 - k_z^2} \xi_z \cos\varphi} \xi_z \cos k_z \xi_z. \quad (\text{A 1.30})$$

Der Integrand in (A 1.30) ist eine ungerade Funktion von ξ_z .

Es gilt also:

$$\lim_{L \rightarrow \infty} (\tau_1^L + \tau_{4,1}^L) = 0. \quad (\text{A 1.31})$$

5) Nun berechnen wir $\tau_2^L + \tau_{4,2}^L$:

$$\begin{aligned} \tau_2^L + \tau_{4,2}^L &= \frac{8}{(2\pi)^3} \int_{-L}^{\infty} dz \int d^3k \theta(k_0^2 - k^2) \left\langle \frac{\partial}{\partial k_0 \partial a} \left\{ \chi_a^*(k_1, k_2, z) \cdot \right. \right. \\ &\quad \left. \left[\frac{k^2}{2m} \left(-\frac{\partial^2}{\partial z^2} + k_z^2 \right) - e_{k_0} + U_{\infty}^R(z\xi_z) \right] \chi_a(k_1, k_2, z) \right\} + \int d^3\xi \cdot \\ &\quad \left. \tilde{U}_{\infty}(z\xi_z, \vec{\xi}) e^{-i\vec{k}_1 \vec{\xi}} \frac{\partial}{\partial a} \left\{ \chi_a^*(k_1, k_2, z + \frac{1}{2}\xi_z) \chi_a(k_1, k_2, z - \frac{1}{2}\xi_z) \right\} \right\rangle \Big|_{a=k_{\infty 0}} \end{aligned} \quad (\text{A 1.32})$$

Wegen der Kernmaterie-Sättigungseigenschaften von $\hat{K}$ gilt:

$$\left. \frac{\partial e_{k_0}}{\partial k_0} \right|_{k_0=k_{\infty 0}} = 0, \quad (\text{A 1.33})$$

(vgl. 4.3.20). Wir können also in (A 1.32), e_{k_0} durch $e_{k_{\infty 0}}$ ersetzen.

Zur Auswertung von (A 1.32) verwenden wir Gl. (A 1.1) sowie ihre - unter Berücksichtigung der Hermitizität von K gewonnenen - konjugiert komplexe Form

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left(-\frac{\partial^2}{\partial z^2} + k_{\perp}^2 \right) \chi_a^* (k_{\perp}, k_z, z) + \int d^3\xi \mathcal{U}_a \left[\left(z + \frac{1}{2} \xi_z \right) \vec{e}_z, \vec{\xi} \right] e^{-i\vec{k}_{\perp} \cdot \vec{\xi}_{\perp}} \cdot$$

$$\chi_a^* (k_{\perp}, k_z, z + \xi_z) = \varepsilon_a(k) \chi_a^* (k_{\perp}, k_z, z), \quad (\text{A 1.34})$$

indem wir unter Berücksichtigung von (A 1.4) zu (A 1.32) den Term

$$0 = \frac{g}{(2\pi)^3} \int_{-L}^{\infty} dz \int d^3k \, \Theta(k_0^2 - k^2) \left[\varepsilon_{\infty}(k) - \mathcal{U}_{\infty}(z \vec{e}_z) \right] \cdot$$

$$\frac{\partial}{\partial a} \left\{ \chi_a^* (k_{\perp}, k_z, z) \chi_a (k_{\perp}, k_z, z) \right\}$$

$$- \int d^3\xi \, \tilde{\mathcal{U}}_{\infty} \left[\left(z - \frac{1}{2} \xi_z \right) \vec{e}_z, \vec{\xi} \right] e^{-i\vec{k}_{\perp} \cdot \vec{\xi}_{\perp}} \chi_a (k_{\perp}, k_z, z - \xi_z) \frac{\partial}{\partial a} \chi_a^* (k_{\perp}, k_z, z)$$

$$- \int d^3\xi \, \tilde{\mathcal{U}}_{\infty} \left[\left(z + \frac{1}{2} \xi_z \right) \vec{e}_z, \vec{\xi} \right] e^{-i\vec{k}_{\perp} \cdot \vec{\xi}_{\perp}} \chi_a^* (k_{\perp}, k_z, z + \xi_z) \frac{\partial}{\partial a} \chi_a (k_{\perp}, k_z, z)$$

$$- \frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \left(-\frac{\partial^2}{\partial z^2} + k_{\perp}^2 \right) \chi_a^* (k_{\perp}, k_z, z) \right\} \frac{\partial}{\partial a} \chi_a^* (k_{\perp}, k_z, z)$$

$$- \frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \left(-\frac{\partial^2}{\partial z^2} + k_{\perp}^2 \right) \chi_a^* (k_{\perp}, k_z, z) \right\} \frac{\partial}{\partial a} \chi_a (k_{\perp}, k_z, z) \Bigg|_{\substack{k_0 = k_{\infty 0} \\ a = a_{\infty}}} \quad (\text{A 1.35})$$

hinzufügen.

Insgesamt ergibt sich dann:

$$\tau_z^L + \tau_{4,2}^L = \tau_{2a}^L + \tau_{2b}^L + \tau_{2c}^L, \quad (\text{A 1.36})$$

wobei

$$\gamma_{2a}^L = \frac{8}{(2\pi)^3} \int d^3k \, \Theta(k_0^2 - k^2) [\xi_\infty(k) - c_{k_{\infty 0}}] \int_{-L}^{\infty} dz \cdot$$

$$\frac{\partial}{\partial a} \left\{ \chi_a^*(k_\perp, k_z, z) \chi_a(k_\perp, k_z, z) \right\} \Big|_{\substack{k_0=k_{\infty 0} \\ a=a_{\infty}}} \quad (A \, 1.37)$$

$$\gamma_{26}^L = \int d^3\xi \int_{-L}^{\infty} dz \left[L(z, \xi) - L(z - \frac{1}{2}\xi_z, \xi) + L^*(z, \xi) - \right.$$

$$\left. L^*(z - \frac{1}{2}\xi_z, \xi) \right] \quad (A \, 1.38)$$

$$\gamma_{2c}^L = \frac{8}{(2\pi)^3} \int d^3k \, \Theta(k_0^2 - k^2) \int_{-L}^{\infty} dz \left\{ \chi_a^*(k_\perp, k_z, z) \left(-\frac{k_z}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \cdot \right.$$

$$\left. \frac{\partial}{\partial a} \chi_a(k_\perp, k_z, z) - \left[\frac{\partial}{\partial a} \chi_a(k_\perp, k_z, z) \right] \left(-\frac{k_z}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \chi_a^*(k_\perp, k_z, z) \right\} \Big|_{\substack{k_0=k_{\infty 0} \\ a=a_{\infty}}} \quad (A \, 1.39)$$

Hierbei ist

$$L(z, \xi) = \frac{8}{(2\pi)^3} \int d^3k \, \Theta(k_0^2 - k^2) \tilde{U}_\omega(z \vec{e}_z, \xi) e^{-i \vec{k}_\perp \vec{\xi}_\perp} \chi_a(k_\perp, k_z, z - \frac{1}{2}\xi_z) \cdot$$

$$\frac{\partial}{\partial a} \chi_a^*(k_\perp, k_z, z + \frac{1}{2}\xi_z) \Big|_{\substack{k_0=k_{\infty 0} \\ a=a_{\infty}}} \quad (A \, 1.40)$$

6) Wir werten zunächst γ_{26}^L aus. Es ergibt sich

$$\gamma_{26}^L = \int d^3\xi \left[\int_{-L}^{-L - \frac{1}{2}\xi_z} L(z, \xi) + \int_{-L}^{-L + \frac{1}{2}\xi_z} L^*(z, \xi) \right] \quad (A \, 1.41)$$

Für grosses L erhält man wegen der asymptotischen Eigenschaften (4.6.12) der Wellenfunktionen:

$$L(z, \xi) = \frac{8}{(2\pi)^3} \int d^3k \, \Theta(k_0^2 - k^2) e^{-i \vec{k}_\perp \vec{\xi}_\perp} \tilde{U}_\omega(\xi) \cdot$$

$$\frac{1}{2} [\sin(-2k_z z + 2\varphi) + \sin(k_z \xi_z)] \frac{\partial \varphi_a}{\partial a} \Big|_{\substack{k_0=k_{\infty 0} \\ a=a_{\infty}}} \quad (A \, 1.42)$$

wobei

$$\varphi_a = \varphi_a(k_\perp, k_z) \quad (A \, 1.43)$$

Unter Benutzung der Distributionsgleichungen (A 1.28) und (A 1.29) erhalten wir

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \tau_{2c}^L = \frac{1}{2} \frac{g}{(2\pi)^3} \int d^3k \, \Theta(k_0^2 - k^2) \int d^3\xi \, e^{-i\vec{k}_\perp \vec{\xi}_\perp} \tilde{U}_\infty(\xi) \cdot \left(\frac{\partial}{\partial k_z} \cos k_z \xi_z \right) \cdot \frac{\partial \partial_a}{\partial a} \Big|_{\substack{k_0 = k_{00} \\ a = a_{00}}} \quad (\text{A 1.44})$$

Mit

$$\int d^3\xi \, e^{-i\vec{k} \vec{\xi}} \tilde{U}_\infty(\xi) = \tilde{U}_\infty(k) \quad (\text{A 1.45})$$

ergibt sich hieraus:

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \tau_{2c}^L = \frac{g}{(2\pi)^3} \int d^3k \, \Theta(k_0^2 - k^2) \cdot \frac{1}{2} \left[\frac{\partial}{\partial k_z} \tilde{U}_\infty(k) \right] \cdot \frac{\partial \partial_a}{\partial a} \Big|_{\substack{k_0 = k_{00} \\ a = a_{00}}} \quad (\text{A 1.46})$$

7) Um τ_{2c}^L zu berechnen, integrieren wir partiell nach z .

Es ergibt sich:

$$\tau_{2c}^L = - \frac{g}{(2\pi)^3} \int d^3k \, \Theta(k_0^2 - k^2) \left\{ \chi_a^*(k_\perp, k_z, z) \frac{\partial}{\partial a} \left(-\frac{k_z^2}{2m} \frac{\partial}{\partial z} \right) \chi_a(k_\perp, k_z, z) - \left[\frac{\partial}{\partial a} \chi_a(k_\perp, k_z, z) \right] \left(-\frac{k_z^2}{2m} \frac{\partial}{\partial z} \right) \chi_a^*(k_\perp, k_z, z) \right\} \Big|_{\substack{z = -L \\ k_0 = k_{00} \\ a = a_{00}}} \quad (\text{A 1.47})$$

Für grosse L können für die Wellenfunktionen wieder die asymptotischen Eigenschaften (4.6.12) ausgenutzt werden. Man erhält dann

$$\tau_{2c}^L = \frac{1}{2} \frac{g}{(2\pi)^3} \int d^3k \, \Theta(k_0^2 - k^2) \left(\frac{\partial}{\partial k_z} \frac{k_z^2}{2m} \right) \frac{\partial \partial_a}{\partial a} \Big|_{\substack{k_0 = k_{00} \\ a = a_{00}}} \quad (\text{A 1.48})$$

Wir fassen nun die rechten Seiten von (A 1.46) und (A 1.48) zusammen. Es ergibt sich

$$\lim_{L \rightarrow \infty} (\chi_{2b}^L + \chi_{2c}^L) = \frac{8}{(2\pi)^3} \int d^3k \, \Theta(k_0^2 - k^2) \cdot \frac{1}{2} \frac{\partial \varepsilon_\omega(k)}{\partial k_z} \frac{\partial \vartheta_a}{\partial a} \Big|_{\substack{k_0 = k_{\omega_0} \\ a = a_m}} \quad (A 1.49)$$

(vgl. (4.6.10/11))

8) Um χ_{2a}^L zu berechnen, können wir für endliches L die Differentiation $\frac{\partial}{\partial a}$ mit der Integration $\int_{-L}^{\infty} dz$ vertauschen. Wegen der "Orthonormierungsrelation" (4.6.13) gilt für grosses L:

$$\begin{aligned} \chi_{2a}^L &= \frac{8}{(2\pi)^3} \int d^3k \, \Theta(k_0^2 - k^2) [\varepsilon_\omega(k) - e_{k_{\omega_0}}] \left\{ -\frac{1}{2} \frac{\sin(2k_z L)}{2k_z} \right. \\ &\quad \left. \frac{\partial}{\partial a} \cos \vartheta_a - \frac{1}{2} \cos(2k_z L) \cdot \frac{\partial}{\partial a} \frac{\sin(2\vartheta_a)}{2k_z} + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial k_z} \frac{\partial \vartheta_a}{\partial a} \right\} \Big|_{\substack{k_0 = k_{\omega_0} \\ a = a_m}} \end{aligned} \quad (A 1.50)$$

Berücksichtigt man wiederum die Distributionsgleichungen (A 1.28) und (A 1.29) und

$$\cos \vartheta_a \Big|_{k_z=0} = 1, \quad (A 1.51)$$

also:

$$\frac{\partial}{\partial a} \cos \vartheta_a \Big|_{k_z=0} = 0, \quad (A 1.52)$$

so ergibt sich

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \chi_{2a}^L = \frac{8}{(2\pi)^3} \int d^3k \, \Theta(k_0^2 - k^2) [\varepsilon_\omega(k) - e_{k_{\omega_0}}] \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial k_z} \frac{\partial \vartheta_a}{\partial a} \Big|_{\substack{k_0 = k_{\omega_0} \\ a = a_m}} \quad (A 1.53)$$

Dieses Ergebnis fassen wir mit (A 1.49) zusammen:

$$\lim_{L \rightarrow \infty} (\tau_2^L + \tau_{4,2}^L) = \frac{1}{2} \frac{g}{(2\pi)^3} \int d^3k \, O(k_0^2 - k^2) \frac{\partial}{\partial k_z} \left\{ [\varepsilon_\infty(k) - e_{k_{\omega_0}}] \frac{\partial \mathcal{D}_a}{\partial a} \right\} \Big|_{\substack{k_0 = k_{\omega_0} \\ a = a_\infty}} \quad (\text{A 1.54})$$

Hieraus ergibt sich

$$\lim_{L \rightarrow \infty} (\tau_2^L + \tau_{4,2}^L) = \frac{g}{(2\pi)^3} 2\pi \int_0^{k_0} dk_\perp k_\perp \int_{-\sqrt{k_0^2 - k_\perp^2}}^{\sqrt{k_0^2 - k_\perp^2}} dk_z \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial k_z} \left\{ [\varepsilon_\infty(k) - e_{k_{\omega_0}}] \frac{\partial \mathcal{D}_a}{\partial a} \right\} \Big|_{\substack{k_0 = k_{\omega_0} \\ a = a_\infty}} \quad (\text{A 1.55})$$

Partielle Integration liefert:

$$\lim_{L \rightarrow \infty} (\tau_2^L + \tau_{4,2}^L) = [\varepsilon_\infty(k_{\omega_0}) - e_{k_{\omega_0}}] \cdot \frac{g}{(2\pi)^2} 2 \int_0^{k_0} dk_\perp k_\perp \frac{\partial \mathcal{D}_a}{\partial a} \Big|_{\substack{k_0 = k_{\omega_0} \\ a = a_\infty}} \quad (\text{A 1.56})$$

$\varepsilon_\infty(k_{\omega_0})$ ist aber gerade gleich der Fermienergie. Wegen des Theorems von Hugenholtz-van Hove verschwindet also die rechte Seite von (A 1.56):

$$\lim_{L \rightarrow \infty} (\tau_2^L + \tau_{4,2}^L) = 0 \quad (\text{A 1.57})$$

9) Wir untersuchen jetzt noch die Summe von τ_3^L und τ_5^L :

Es ist

$$\tau_3^L + \tau_5^L = \frac{1}{2} \int_{-L}^{\infty} dz \int d^3\xi \, \hat{K} \left[\eta \left(\frac{z+z'}{2}, \vec{e}_0 \right), z\vec{e}_2 - \frac{z'}{2}\vec{e}_1, 2\vec{\xi} \right] \cdot \left\{ \tilde{n}_{k_{0,q}}(z\vec{e}_2 - \vec{\xi}) \frac{\partial}{\partial k_0 \partial a} \tilde{n}_{k_{0,q}}(z\vec{e}_2, \vec{\xi}) - \tilde{n}_{k_{0,q}}(z\vec{e}_2, \vec{\xi}) \frac{\partial}{\partial k_0 \partial a} \tilde{n}_{k_{0,q}}(z\vec{e}_2 - \vec{\xi}) \right\} \Big|_{\substack{k_0 = k_{\omega_0} \\ a = a_\infty}} \quad (\text{A 1.58})$$

Wir substituieren

$$\hat{z}' = \hat{z} - z \vec{e}_z \quad (z \text{ fest}) , \quad (\text{A 1.59})$$

$$z'' = z + \frac{1}{2} \hat{z}' \quad (\hat{z}' \text{ fest}) . \quad (\text{A 1.60})$$

Es ergibt sich dann

$$r_3^L + r_5^L = \int d\hat{z}' \int_{-L+\frac{1}{2}\hat{z}'}^{\infty} dz'' u(z'', \hat{z}'), \quad (\text{A 1.61})$$

wobei

$$\begin{aligned} u(z'', \hat{z}') = & \frac{1}{2} \int d^3\xi \int d^2\hat{r}'_1 \hat{K} \left[u_{k_0, \alpha}(\vec{e}_z, -\hat{z}'\vec{e}_z - \frac{\hat{r}'_1}{2}, 2\xi) \right. \\ & \left\{ \tilde{u}_{k_0, \alpha}((z'' - \frac{1}{2}\hat{z}')\vec{e}_z, -\xi) \frac{\partial}{\partial k_0, \partial \alpha} \tilde{u}_{k_0, \alpha}((z'' + \frac{1}{2}\hat{z}')\vec{e}_z, \xi) - \right. \\ & \left. \left. \tilde{u}_{k_0, \alpha}((z'' + \frac{1}{2}\hat{z}')\vec{e}_z, \xi) \frac{\partial}{\partial k_0, \partial \alpha} \tilde{u}_{k_0, \alpha}((z'' - \frac{1}{2}\hat{z}')\vec{e}_z, -\xi) \right\} \right]_{\substack{k_0=k_{\omega_0} \\ \alpha=\alpha_{\omega_0}}} . \end{aligned} \quad (\text{A 1.62})$$

Wegen (3.5.20) gilt:

$$\begin{aligned} u(z'', -\hat{z}') = & \frac{1}{2} \int d^3\xi \int d^2\hat{r}'_1 \hat{K} \left[u_{k_0, \alpha}(\vec{e}_z, \hat{z}'\vec{e}_z - \frac{\hat{r}'_1}{2}, 2\xi) \right. \\ & \left\{ \tilde{u}_{k_0, \alpha}((z'' + \frac{1}{2}\hat{z}')\vec{e}_z, \xi) \frac{\partial}{\partial k_0, \partial \alpha} \tilde{u}_{k_0, \alpha}((z'' - \frac{1}{2}\hat{z}')\vec{e}_z, -\xi) - \right. \\ & \left. \left. \tilde{u}_{k_0, \alpha}((z'' - \frac{1}{2}\hat{z}')\vec{e}_z, -\xi) \frac{\partial}{\partial k_0, \partial \alpha} \tilde{u}_{k_0, \alpha}((z'' + \frac{1}{2}\hat{z}')\vec{e}_z, \xi) \right\} \right]_{\substack{k_0=k_{\omega_0} \\ \alpha=\alpha_{\omega_0}}} . \end{aligned} \quad (\text{A 1.63})$$

Wegen der Invarianz von K gegenüber Teilchenvertauschung ergibt sich also:

$$u(z'', -\hat{z}') = -u(z'', \hat{z}') . \quad (\text{A 1.64})$$

u ist eine ungerade Funktion in $\hat{z}'$.

Dann ist

$$\int_{-L+\frac{1}{2}\hat{z}'}^{L+\frac{1}{2}\hat{z}'} d\hat{z}' \int_{-L+\frac{1}{2}\hat{z}'}^{\infty} u(z'', \hat{z}') = \frac{1}{2} \int_{-L+\frac{1}{2}\hat{z}'}^{L+\frac{1}{2}\hat{z}'} d\hat{z}' \int_{-L+\frac{1}{2}\hat{z}'}^{L+\frac{1}{2}\hat{z}'} u(z'', \hat{z}'), \quad (\text{A } 1.65)$$

also

$$\begin{aligned} \tau_3^L + \tau_5^L &= \frac{1}{2} \int d\hat{z}' \int d^3\xi \int d^3r_L' \frac{1}{2} \int_{-L+\frac{1}{2}\hat{z}'}^{L+\frac{1}{2}\hat{z}'} d\hat{z}'' \hat{K} [u(\vec{z}_2''), -\vec{z}_2' - \frac{\hat{z}'}{2}, \vec{\xi}]. \\ &\left\{ \tilde{u}_{k_0, q}((z'' - \frac{1}{2}\hat{z}')\vec{e}_z, -\vec{\xi}) \frac{\partial}{\partial k_0, \partial q} \tilde{u}_{k_0, q}((z'' + \frac{1}{2}\hat{z}')\vec{e}_z, \vec{\xi}) - \right. \\ &\left. \tilde{u}_{k_0, q}((z'' + \frac{1}{2}\hat{z}')\vec{e}_z, \vec{\xi}) \frac{\partial}{\partial k_0, \partial q} \tilde{u}_{k_0, q}((z'' - \frac{1}{2}\hat{z}')\vec{e}_z, -\vec{\xi}) \right\} \Big|_{\substack{k_0=k_{00} \\ q=q_0}}. \end{aligned} \quad (\text{A } 1.66)$$

In (A 1.66) erstreckt sich die $d\hat{z}'$ - Integration wegen der Kurzreichweitigkeit der Kernkräfte nur über einen beschränkten Bereich. Für grosse L können wir darum in (A 1.66) die Kernmaterie-Dichtematrix einsetzen, die nicht mehr von z'' und $\hat{z}'$ abhängt. Dann verschwindet die geschweifte Klammer. -

Es folgt

$$\lim_{L \rightarrow \infty} (\tau_3^L + \tau_5^L) = 0 \quad (\text{A } 1.67)$$

Damit haben wir gezeigt, dass die gesamte rechte Seite von (A 1.13) verschwindet und unsere Behauptung (A 1.8) und (A 1.9) bewiesen.

Anhang 2: Das Theorem von Hohenberg und Kohn²²⁾

- 1) Es soll gezeigt werden, dass für eine fest vorgegebene Zweiteilchenwechselwirkung der HF - Grundzustand $\underline{\Psi}$ sowie die HF - Grundzustandsenergie E Funktionale der Teilchendichte $n(\vec{r})$ sind.

Stellt man sich vor, dass auf die Nukleonen im Kern ausser der gegenseitigen, durch H fest vorgegebenen Wechselwirkung, noch ein äusseres Potential $v(\vec{r})$ einwirkt, so ergibt sich für die Grundzustandsenergie E_v des Hamiltonoperators

$$H_v = V + H:$$

$$E_v = \langle \Psi_v | H_v | \Psi_v \rangle = \int d^3\tau v(\vec{\tau}) n_v(\vec{\tau}) + \langle \Psi_v | H | \Psi_v \rangle. \quad (A 2.1)$$

Ψ_v sei der (der Einfachheit halber als nicht entartet angenommene) HF - Grundzustand von H_v . - Die Teilchendichte $n_v(\vec{r})$ ist dann ein Funktional von $v(\vec{r})$. -

Umgekehrt kann man zeigen, dass bei vorgegebenem $n_v(\vec{r})$ das äussere Potential $v(\vec{r})$ eindeutig durch die Teilchendichte bestimmt wird.

Angenommen, es gäbe ein von $v(\vec{r})$ verschiedenes äusseres Potential $w(\vec{r})$, zu dem ein Grundzustand Ψ_w gehört, von dem sich die gleiche Teilchendichte $n_w(\vec{r})$ herleitet, wie von $v(\vec{r})$, es gälte also:

$$v(\vec{r}) \neq w(\vec{r}), \quad (A 2.2a)$$

$$n_v(\vec{r}) = n_w(\vec{r}). \quad (A 2.2b)$$

Wenn $v(\vec{r})$ sich von $w(\vec{r})$ nicht nur um eine Konstante unterscheidet, dann ist sicher

$$\psi_v \neq \psi_w, \quad (\text{A } 2.3)$$

da ψ_v und ψ_w die Grundzustände der voneinander verschiedenen Hamiltonoperatoren H_v und H_w darstellen. Für die Grundzustandsenergie E_w von H_w gilt:

$$\begin{aligned} E_w &= \langle \psi_w | H_w | \psi_w \rangle < \langle \psi_v | H_w | \psi_v \rangle \\ &= \langle \psi_v | H_v + w - v | \psi_v \rangle, \end{aligned} \quad (\text{A } 2.4)$$

also

$$E_w < E_v + \int d^3r [w(\vec{r}) - v(\vec{r})] n_r(\vec{r}). \quad (\text{A } 2.5)$$

Umgekehrt ergibt sich:

$$\begin{aligned} E_v &= \langle \psi_v | H_v | \psi_v \rangle < \langle \psi_w | H_v | \psi_w \rangle \\ &= \langle \psi_w | H_w + v - w | \psi_w \rangle, \end{aligned} \quad (\text{A } 2.6)$$

also

$$E_v < E_w + \int d^3r [v(\vec{r}) - w(\vec{r})] n_w(\vec{r}). \quad (\text{A } 2.7)$$

Nach Voraussetzung ist

$$n_v(\vec{r}) = n_w(\vec{r}). \quad (\text{A } 2.2b)$$

Es folgt nach Addition von (A 2.5) und (A 2.7) der Widerspruch

$$E_v + E_w < E_v + E_w. \quad (\text{A } 2.8)$$

zur Behauptung (A 2.2a) und (A 2.2b)

$v(\vec{r})$ wird also - bis auf eine Konstante - eindeutig durch die Teilchendichte bestimmt. - $v(\vec{r})$ legt andererseits den

Grundzustand ψ_v bei vorgegebenem H eindeutig fest. Damit ist bewiesen, dass ψ_v und E_v eindeutig durch die Teilchendichte bestimmt werden.

Es ist

$$E_v[n_v(\vec{r})] = \int d^3r v(\vec{r}) n_v(\vec{r}) + E[n_v(\vec{r})], \quad (A 2.9)$$

wobei

$$E[n_v(\vec{r})] := \langle \psi_v | H | \psi_v \rangle. \quad (A 2.10)$$

$E[n_v(\vec{r})]$ ist ein universelles Funktional von $n_v(\vec{r})$, dessen Gestalt von der Teilchenzahl (diese ist selbst ein Funktional von $n(\vec{r})$) und von $v(\vec{r})$ nicht abhängt.

- 2) Man kann nun zeigen, dass $E_v[n_v(\vec{r})]$ bezüglich Variationen $\delta n(\vec{r})$ der Grundzustandsdichte $n_v(\vec{r})$ stationär ist, die die Teilchenzahl erhalten und die sich von einem äusseren Potential herleiten: Sei

$$n_w(\vec{r}) = n_v(\vec{r}) + \delta n(\vec{r}), \quad (A 2.11)$$

mit

$$\int d^3r n_w(\vec{r}) = \int d^3r n_v(\vec{r}) = A \quad (A 2.12)$$

und ψ_w der zu dem äusseren Potential $w(\vec{r})$ gehörende HF - Grundzustand von $H_w = W + H$, zu dem die Teilchendichte $n_w(\vec{r})$ gehört.

Wegen der Grundzustandseigenschaft von ψ_v gilt:

$$\langle \psi_w | H_v | \psi_w \rangle > \langle \psi_v | H_v | \psi_v \rangle. \quad (A 2.13)$$

Hieraus folgt mit Gl. (A 2.9) :

$$E_V[n_w(\vec{r})] = \int d^3r V(\vec{r}) n_w(\vec{r}) + E[n_w(\vec{r})] > \int d^3r V(\vec{r}) n_V(\vec{r}) \\ + E[n_V(\vec{r})] = E_V[n_V(\vec{r})]. \quad (\text{A } 2.14)$$

Damit ist die Behauptung bewiesen. -

Für eine beliebige Variation $\delta n(\vec{r})$ von $n_V(\vec{r})$, scheint die Existenz eines sie erzeugenden äußeren Potentials $w(\vec{r})$ im Sinne von (A 2.12) nicht ohne weiteres gewährleistet zu sein. Hohenberg und Kohn weisen jedoch darauf hin, dass bei Ausschluss pathologische Fälle die meisten Teilchendichteveriationen durch ein äusseres Potential $w(\vec{r})$ und einen dazugehörigen Grundzustand ψ_w zu realisieren sein dürften.

Setzt man

$$V(\vec{r}) \equiv 0, \quad (\text{A } 2.15)$$

so folgt aus Gl. (A 2.14):

$$E[n_w(\vec{r})] > E[n(\vec{r})], \quad (\text{A } 2.16)$$

$n(\vec{r})$ ist die Teilchendichte des HF-Grundzustandes ψ von H.

Es wurde also bewiesen, dass der HF - Grundzustand ψ und die HF-Grundzustandsenergie E des Hamiltonoperators H eindeutig durch die Teilchendichte bestimmt werden. Es gilt ausserdem für teilchenzahlerhaltene Variationen von $n(\vec{r})$, die im Sinne von Gl. (A 2.12) aus einem äusseren Potential herleitbar sind:

$$\delta E[n(\vec{r})] = 0. \quad (\text{A } 2.17)$$

Anhang 3 Beispiel für die Berechnung des dynamischen Krümmungsterms

Wir wollen nun die Berechnung von $\sigma_{\infty}^{(d)}$ an einem einfachen Beispiel illustrieren. Hierzu zerlegen wir η_A in

$$\eta_A = \eta_{A \text{ kin}} + \eta_{A \text{ dir}} + \eta_{A \text{ ex}} \quad (\text{A } 3.1)$$

Hierbei ist $\eta_{A \text{ kin}}$ der kinetische Teil der Energiedichte, $\eta_{A \text{ dir}}$ entspricht dem direkten, $\eta_{A \text{ ex}}$ dem Austauschterm. -

Ohne an dieser Stelle einen Ansatz für die Dichteabhängigkeit von $\eta_{A \text{ kin}}$ und $\eta_{A \text{ ex}}$ zu machen, wollen wir unsere Untersuchung auf den Anteil $\eta_{A \text{ dir}}$ beschränken, dessen Abhängigkeit von der Teilchendichte durch

$$\eta_{A \text{ dir}}(r) = \frac{1}{2} U_A(r) \eta_A(r), \quad (\text{A } 3.2)$$

mit

$$U_A(r) = \int d^3r' W(|\vec{r}-\vec{r}'|) \eta_A(r'), \quad (\text{A } 3.3)$$

gegeben ist.

$W(|\vec{r}-\vec{r}'|)$ sei hierbei eine allein vom Relativabstand der Nukleonen abhängende lokale Zweiteilchen-Wechselwirkung.

Zur Berechnung von

$$\hat{\eta}_{A \text{ dir}}(s) = \eta_{A \text{ dir}}(r) \quad (\text{A } 3.4)$$

wollen wir (A 3.2/3) für einen festen Wert von

$$s = r - R_A \quad (\text{A } 3.5)$$

in Zylinderkoordinaten s' und ρ auswerten, die als Integrationsvariable in dem Bereich, in dem der Integrand von

Null verschieden ist, beim Grenzübergang $A \rightarrow \infty$ beschränkt bleiben. Sei

$$s' = \frac{\vec{r} \cdot \vec{r}'}{r} - R_A, \quad (\text{A } 3.6)$$

$$\rho = \sqrt{r'^2 - \left(\frac{\vec{r} \cdot \vec{r}'}{r}\right)^2}. \quad (\text{A } 3.7)$$

Dann geht

$$\hat{\eta}_{A, \text{dir}}(s) = \pi \int_0^\infty d\rho \rho \int_{-\infty}^{+\infty} ds' W(\sqrt{(s-s')^2 + \rho^2}) \cdot \hat{u}_A(\sqrt{(s'+R_A)^2 + \rho^2} - R_A) \hat{u}_A(s) \quad (\text{A } 3.8)$$

wegen

$$\sqrt{(s'+R_A)^2 + \rho^2} - R_A = s' + \frac{1}{2} \rho^2 R_A^{-1} + O(R_A^{-2}) \quad (\text{A } 3.9)$$

für $A \rightarrow \infty$ in

$$\hat{\eta}_{\infty, \text{dir}}(s) = \pi \int_0^\infty d\rho \rho \int_{-\infty}^{+\infty} ds' W(\sqrt{(s-s')^2 + \rho^2}) \hat{u}_\infty(s') \hat{u}_\infty(s) \quad (\text{A } 3.10)$$

über, da bei diesem Grenzübergang das Argument $\sqrt{(s-s')^2 + \rho^2}$ von W und damit s' und ρ wegen der endlichen Reichweite der Kernkräfte beschränkt bleiben können.

In (A 3.8) hängt $\hat{\eta}_{A, \text{dir}}(s)$ offensichtlich implizit über das Teilchendichteprofil $\hat{u}_A(s)$ und explizit über den Kernradius R_A von der Teilchenzahl A ab. - Wir berechnen jetzt $\hat{\eta}'_{\infty, \text{dir}}(s)$.

Wegen (A 3.9) ergibt sich:

$$\hat{u}_A(\sqrt{(s+R_A)^2 + \rho^2} - R_A) = \hat{u}_A(s' + \frac{\rho^2}{2R_A} A^{-1/3} + O(A^{-2/3})) \quad (\text{A } 3.11)$$

$$= \hat{u}_A(s') + \frac{\partial \hat{u}_A(s')}{\partial s'} \frac{\rho^2}{2R_A} A^{-1/3} + O(A^{-2/3}), \quad (\text{A } 3.12)$$

und wir erhalten für $\hat{\eta}'_{\infty, \text{dir}}(s)$:

$$\hat{\eta}'_{\infty, \text{dir}}(s) = \frac{\pi}{2v_\infty} \int_0^\infty d\rho \rho^3 \int_{-\infty}^{+\infty} ds' W(\sqrt{(s-s')^2 + \rho^2}) \frac{\partial \hat{n}_\infty(s')}{\partial s'} \hat{n}_\infty(s) + \quad (\text{A 3.13})$$

$$\pi \int_0^\infty d\rho \rho \int_{-\infty}^{+\infty} ds' W(\sqrt{(s-s')^2 + \rho^2}) \frac{\partial}{\partial (K^{-1/2}s)} [\hat{n}_A(s') \hat{n}_A(s)] \Big|_{A \rightarrow \infty} \quad (\text{A 3.14})$$

Die zweite Zeile von (A 3.14) steht für die implizite Teilchenzahlabhängigkeit von η_A dir über das Teilchendichteprofil $\hat{n}_A(s)$. Sie leistet nach (4.5.7) keinen Beitrag zu $\hat{\sigma}_\infty^{\text{dir}}$, obgleich sie selbst von Null verschieden sein kann.

9 Abbildungen

Abb. 2

Die dimensionslose Energie pro Teilchen $\frac{e}{T}$ (T wurde auf 1 normiert) als Funktion des dimensionslosen Fermiimpulses $\tilde{k}_0$ für verschiedene Werte des Bindungsparameters λ . Für $\lambda < \lambda^c$ ist keine Bindung möglich, für $\lambda > \lambda^o$ wird $\frac{e}{T}$ negativ. Erst in diesem Bereich ist die stabile Bindung endlicher Nukleonensysteme möglich. λ^{nm} entspricht dem empirischen Kernmateriewert.

Abb. 3

Stabile und labile Gleichgewichtswerte des dimensionslosen Fermiimpulses $\tilde{k}_{\omega_0}$ in Abhängigkeit vom Bindungsparameter λ . $\tilde{k}_{\omega_0} < \tilde{k}_{\omega_0}^c$ entspricht den Maxima der Bindungsenergien pro Teilchen in Abb. 2, $\tilde{k}_{\omega_0} > \tilde{k}_{\omega_0}^c$ den Minima, also den Sättigungswerten. Zwischen $\tilde{k}_{\omega_0}^c$ und $\tilde{k}_{\omega_0}^o$ sind nur "metastabile" Systeme möglich, da die Bindungsenergie in diesem Bereich positiv ist; $\tilde{k}_{\omega_0}^{nm}$ entspricht dem empirische, $\tilde{k}_{\omega_0}^{as}$ dem asymptotischen Wert ($\lambda \rightarrow \infty$).

Abb. 4

Die Teilchendichte $\frac{n(z)}{n_0}$ der semiinfiniten Nukleonenteilung. - Es wurde ein Wood - Saxon - Einteilchenpotential mit $V_0 = -53.13$ MeV, $a = 0.7$ fm (vgl. (6.2.3)) zugrundegelegt.

Abb. 5

Die Oberflächenspannung σ als Funktion des Fermiimpulses k_0 mit den MDI-Parameter (6.1.4/5/6). Für den Sättigungswert $k_0 = k_{\infty} = 1.33 \text{ fm}^{-1}$ ergibt sich in guter Näherung ein Maximum von σ .

Abb. 6

Der Oberflächenenergiekoeffizient $\beta_0 = 4\pi r_{\infty}^2 \sigma_{\infty}$ in Abhängigkeit vom Nichtlokalitätsparameter β . $\phi = 0$ und $\phi = 1/9$ kennzeichnen die Werte von $4\pi r_{\infty}^2 \sigma^{\text{TFW}}(0)$ und $4\pi r_{\infty}^2 \sigma^{\text{TFW}}(1/9)$. Der Berechnung von $\sigma^{\text{TFW}}(\phi)$ wurde dabei die kinetische Energiedichte (6.2.14) zugrundegelegt.

Abb. 7

Die Abhängigkeit der Oberflächenspannung σ minimisierenden Wood-Saxon-Potentialparameters a_{∞} vom Nichtlokalitätsparameter β .

Abb. 8

Die Darstellung des Weizsäckerfaktors ϕ_{∞} in Abhängigkeit vom Nichtlokalitätsparameter β . Für $\phi = \phi_{\infty}$ ergibt sich $\sigma^{\text{TFW}}(\phi) = \sigma_{\infty}$. Die gestrichelte Linie kennzeichnet den Wert $\phi = 1/9$ (Kirzhnits⁹³).

Abb. 9

Krümmungs- und Kompressionsenergiekoeffizienten in Abhängigkeit vom Nichtlokalitätsparameter β . Die mit $\phi = 0$ bzw. $\phi = 1/9$ gekennzeichneten Kurven entsprechen den mit der kinetischen Energiedichte (6.2.14) für $\phi = 0$ und $\phi = 1/9$ berechneten Werten der Krümmungsenergien. Für $\gamma_{c \text{ curv}}$ wurde ϕ_{∞} zugrundegelegt, also der Wert des Weizsäckerfaktors, für den sich die exakte HF - Oberflächenspannung ergibt. ($\sigma^{\text{TFW}}(\phi_{\infty}) = \sigma_{\infty}$). Die gestrichelte Linie entspricht $\beta = 646.4 \text{ MeV fm}^5$ (vgl. (6.1.5)).

Abb. 10

Darstellung der Hartree - Fock - Dichte τ^{HF}/τ_0 (vgl. (5.1.12)) sowie deren Approximationen $\tau^{\text{TFW}}(\phi = 0)/\tau_0$ und $\tau^{\text{TFW}}(\phi = 1/9)/\tau_0$ (vgl. (5.3.7)) für die Wood - Saxon - Parameter $V_0 = -53.13 \text{ MeV}$ $a = 0.7 \text{ fm}$.

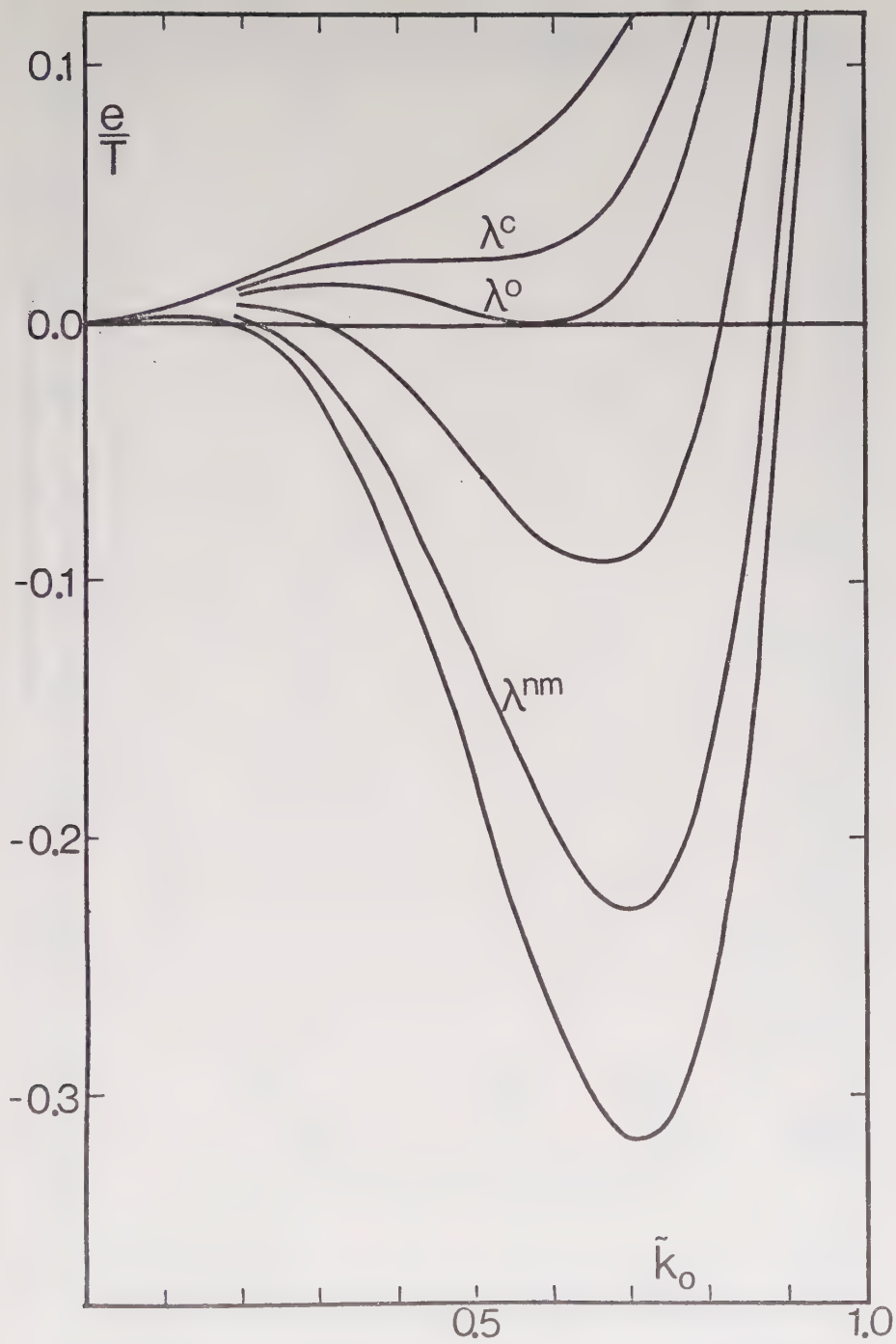


Abb. 2

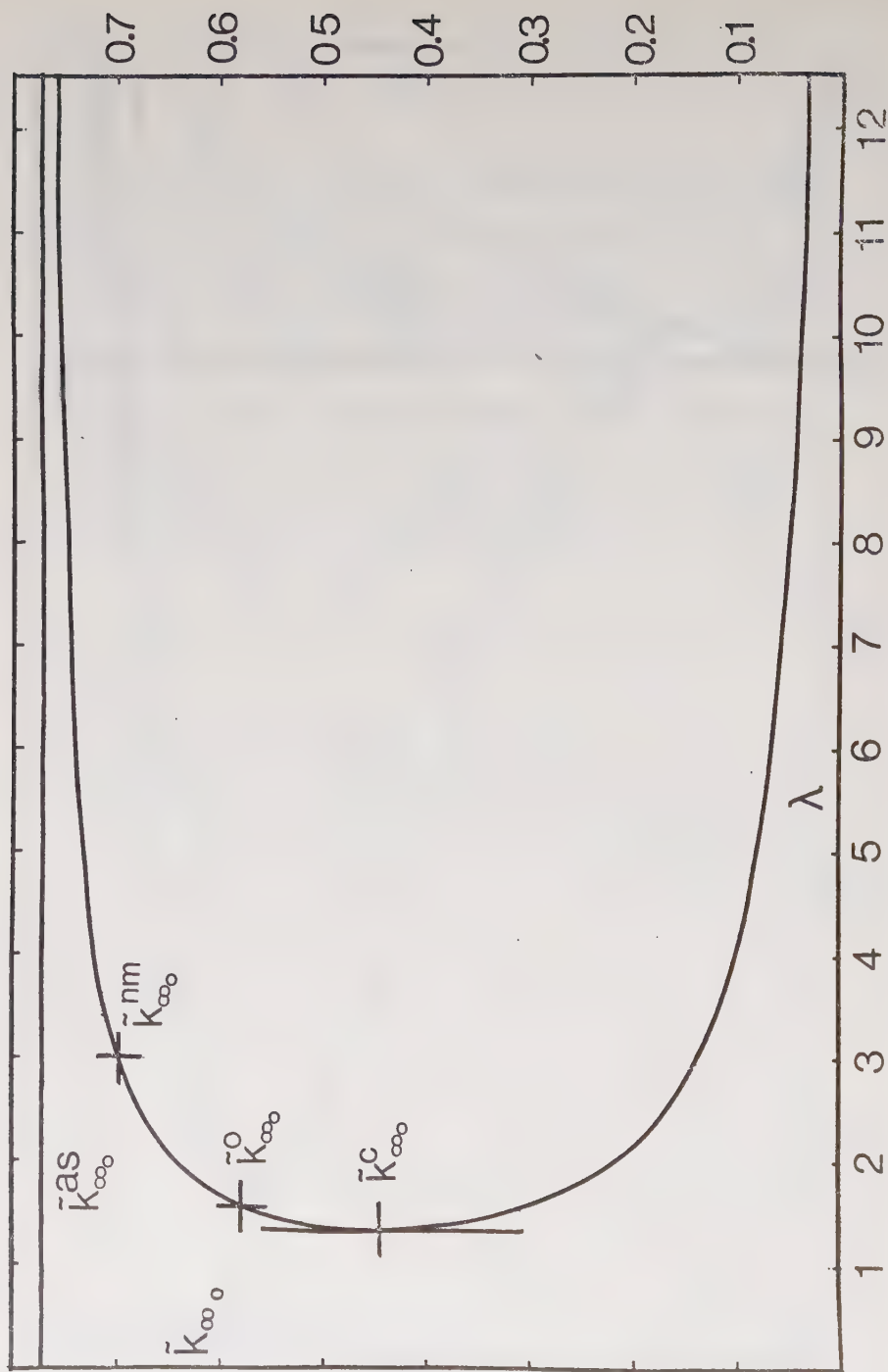


Abb.3

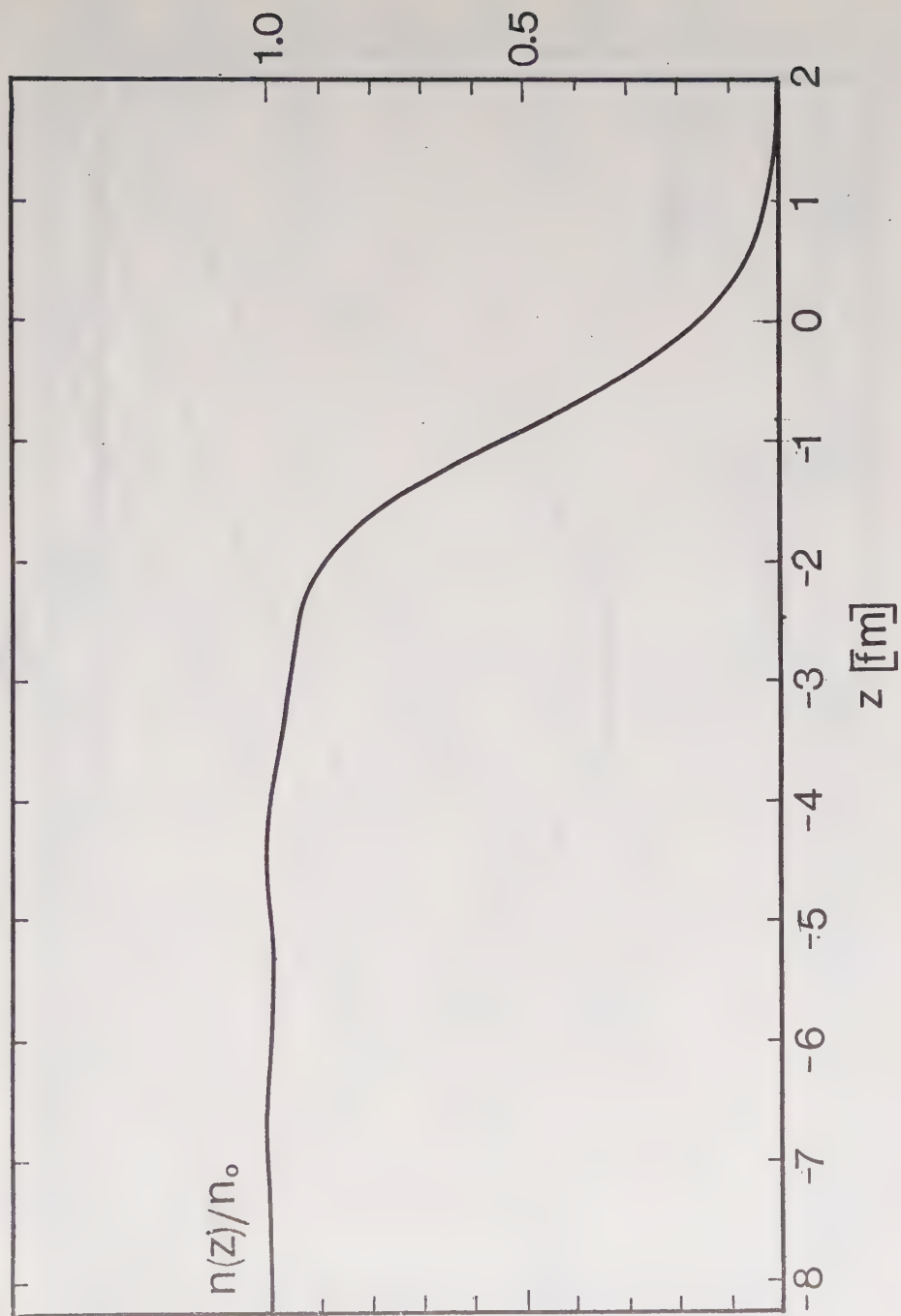


Abb.4

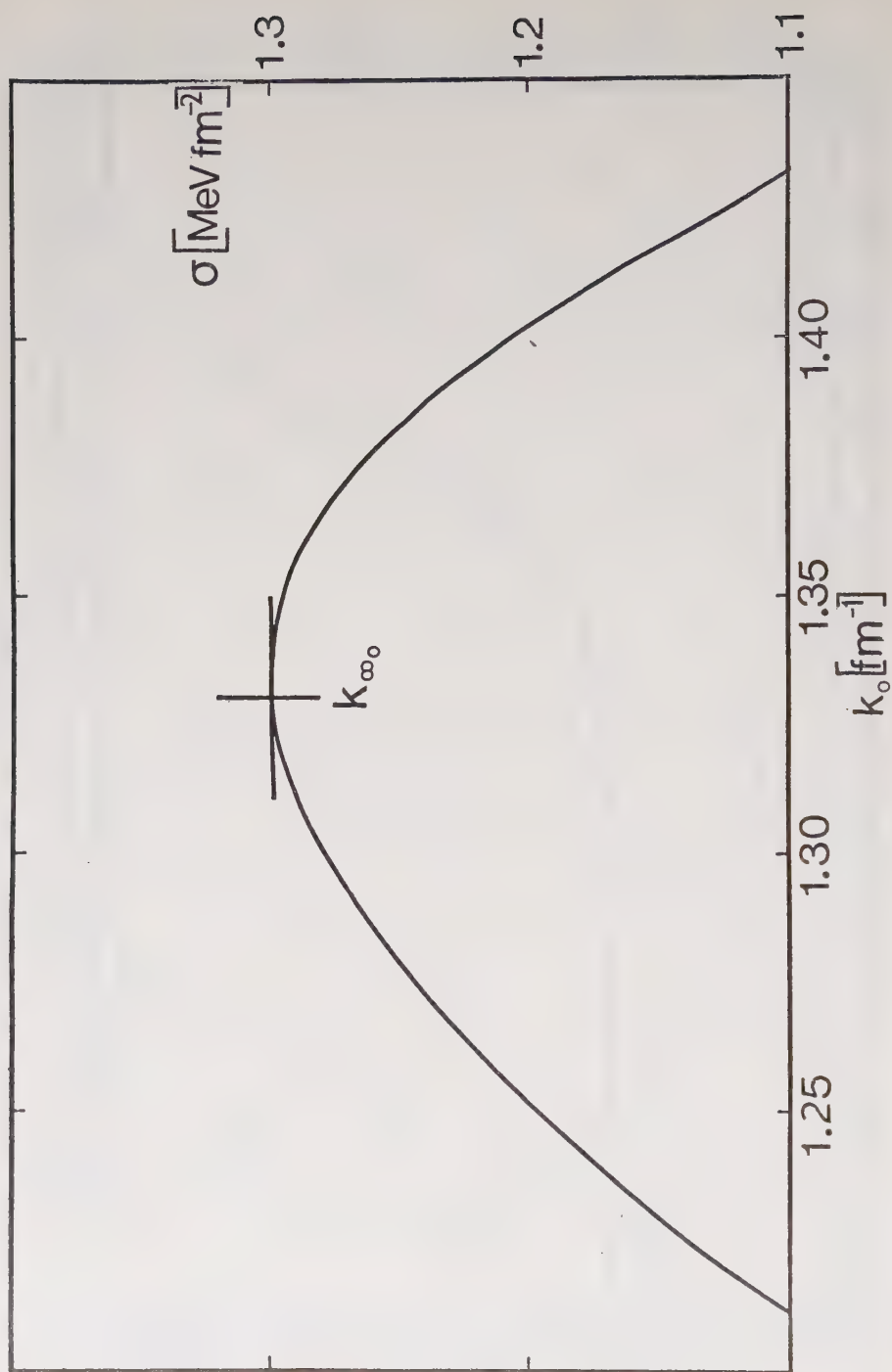


Abb.5

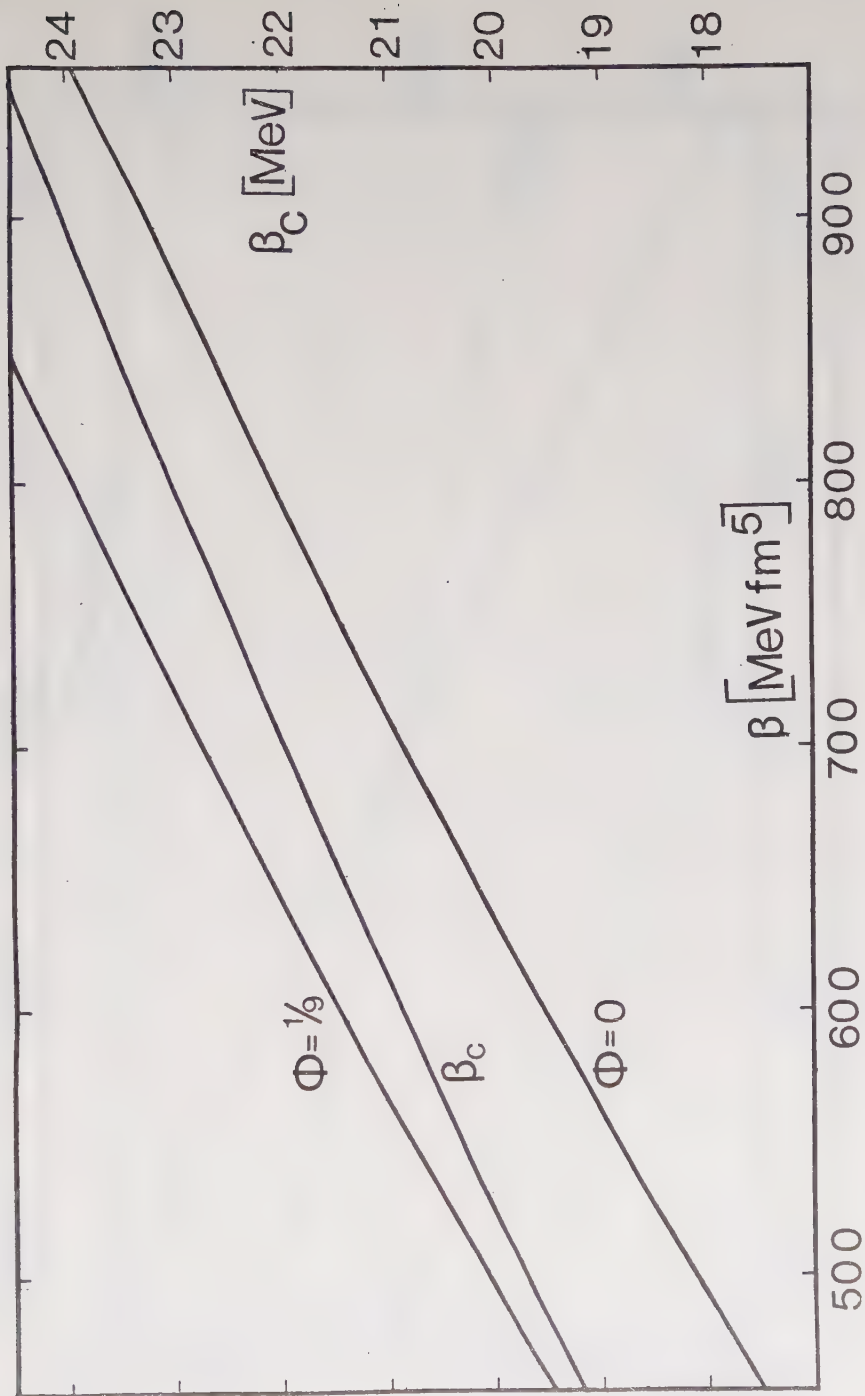


Abb.6

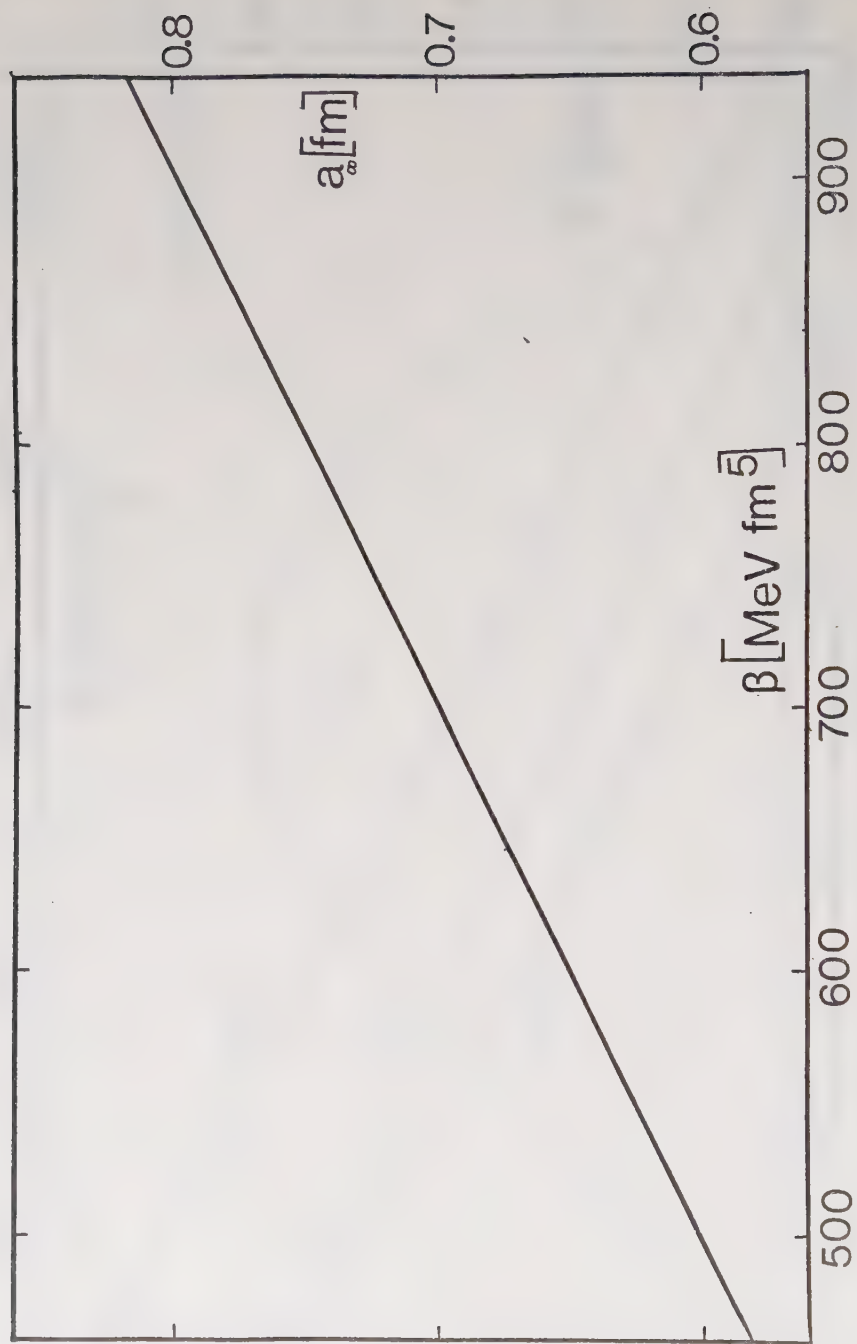
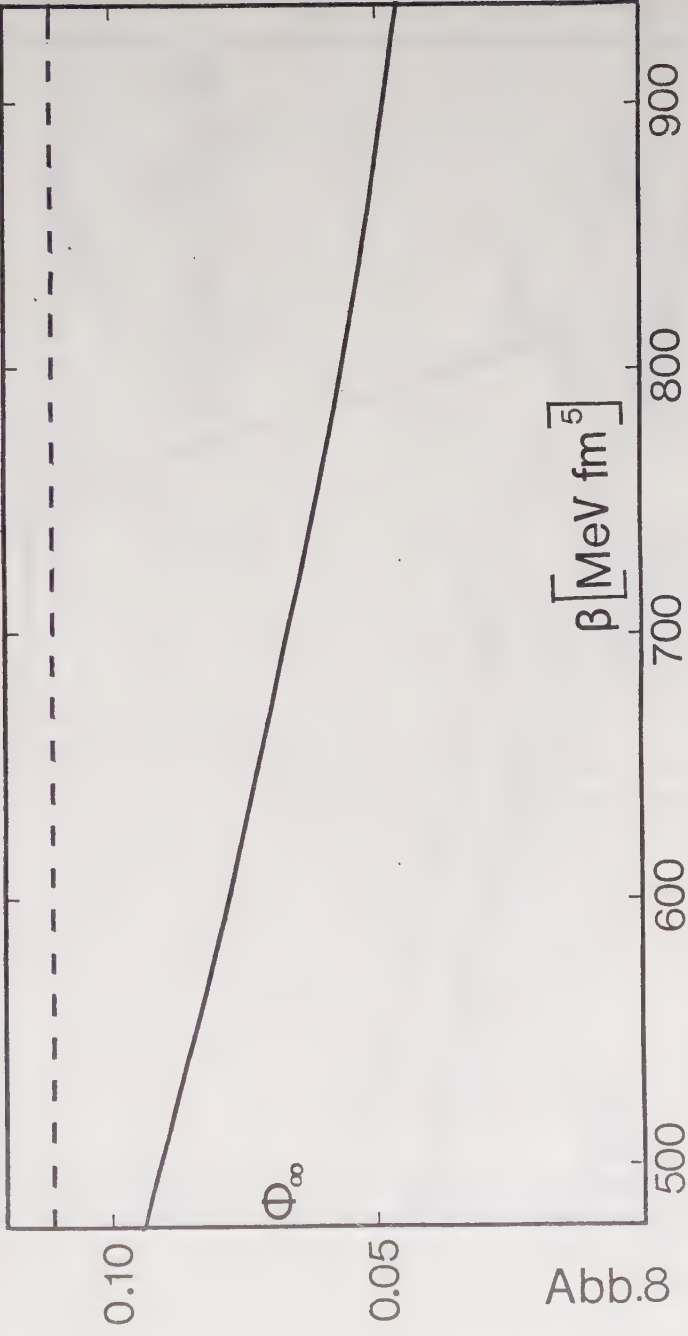


Abb.7



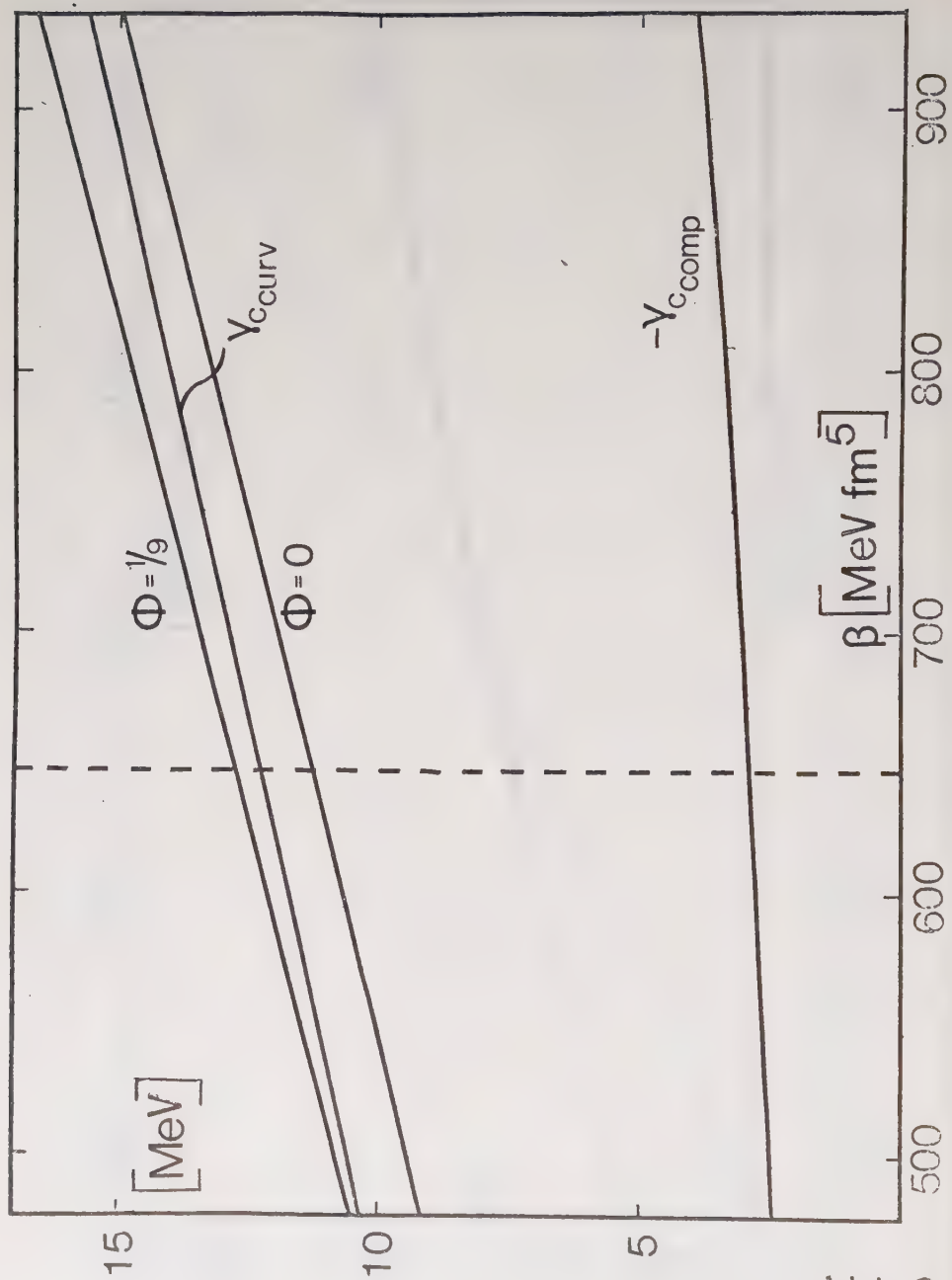


Abb.9

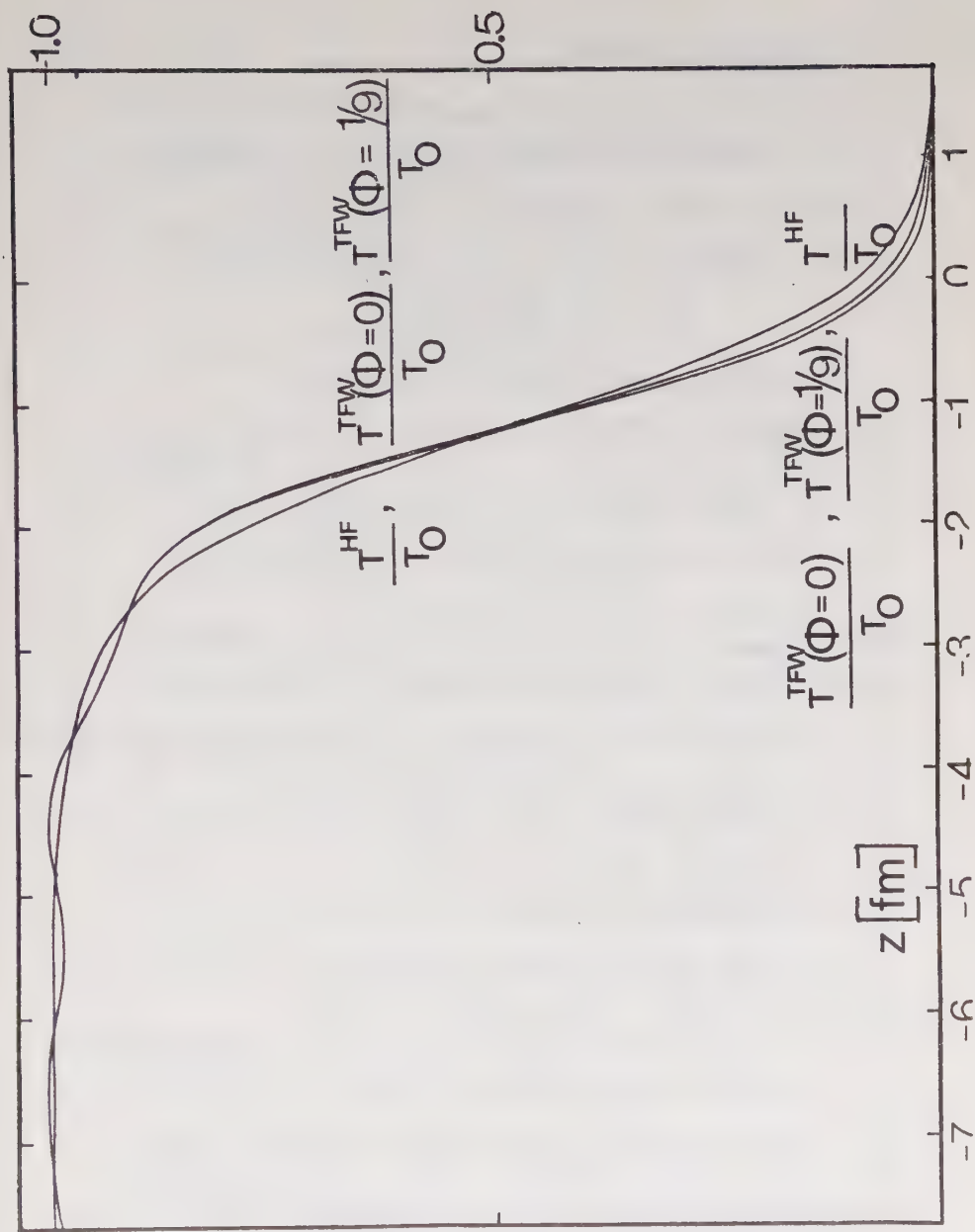


Abb.10

10 Literaturverzeichnis

- 1) C.F. v. Weizsäcker, Z.f.Phys. 96 (1935) 431
- 2) H.A. Bethe and R.F. Bacher, Rev.Mod.Phys. 8 (1936) 8
- 3) W.J. Swiatecki, Proc.Phys. Soc. A 64 (1951) 225
- 4) R.A. Berg und L. Wilets, Phys. Rev. 101 (1956) 201
- 5) L. Wilets, Phys. Rev. 101 (1956) 1805
Rev. Mod. Phys. 30 (1958) 542
- 6) M. A. Naqvi, Nucl. Phys. 10 (1959) 256
- 7) L. Rosenfeld, Sommerschule Bergen (1961) 126
- 8) B.H.J. McKellar and M.A. Naqvi, Nucl.Phys. 71 (1965) 161
- 9) H.S. Köhler, Nucl.Phys. A 91 (1967) 593
- 10) F. Tabakin and K. Amos, Nucl.Phys. A100 (1967) 574
- 11) H.A. Bethe, Phys. Rev. 167 (1968) 879
- 12) J. Nemeth and H.A. Bethe, Nucl.Phys. A116 (1968) 241
- 13) W.D. Myers, UCRL Rep. 18214 (1968), veröffentlicht in
W.D. Myers and W.J. Swiatecki, Ann.of Phys.(N.Y.) 55 (1969) 395
- 14) I.J. Donnally, Nucl.Phys. A128 (1969) 129
- 15) H.S. Köhler, Nucl.Phys. 139 (1969) 353
- 16) P.J. Siemens, Phys.Rev. C1 (1970) 98
- 17) S.A. Moszkowski, Phys.Rev. C2 (1970) 402
- 18) Y.C. Lin, Nucl.Phys. A140 (1970) 359
- 19) W. Stocker, Nucl.Phys. A166 (1971) 205
- 20) J.W. Ehlers and S.A. Moszkowski, Phys.Rev. C 6 (1972) 217
- 21) J. Randrup, preprint LBL 3413 (1974)
- 22) P. Hohenberg and W. Kohn, Phys.Rev. 136 (1964) 1384
- 23) P.J. Hill and J.A. Wheeler, Phys.Rev. 89 (1953) 1125
- 24) S.A. Guruits, M.A. Migdal and A.M. Polykow,
Sov. Phys. JETP 19,1 (1964) 149
- 25) E. Hill and G. Süßmann, Physics Letters 21 (1966) 654

- 26) S. Knaak, G. Süßmann, E. Hilf and A. Büttner, Physics Letters 23 (1966) 711
- 27) G. Süßmann: Über die Oberflächenspannung deformierter Kerne, (1967) unveröffentlicht
- 28) J.C. Reynolds, Phys. Rev. 130 (1963) 1891
- 29) P.J. Feibelmann, Physics Letters 26B (1968) 601;
Ann.of Phys. 48 (1968) 369
- 30) W. Stocker, Nucl.Phys. A 140 (1970) 305,
Nucl. Phys. A 159 (1970) 222
- 31) V.M. Strutinski and A.S. Tyapin, Sov.Phys. JETP 18 (1964) 664
- 32) A.S. Tyapin, Sov.J. Of Nucl.Phys. 13 (1971) 18
- 33) S. Knaak, Dissertation, unveröffentlicht
- 34) W. Stocker, Nucl.Phys. A 215 (1973) 591
- 35) C.D. Bennett and D.G. Ravenhall, Phys.Rev. C 10 (1974) 2058
- 36) M. Dworzecka and S. Moszkowski, Phys.Rev. C12 (1975) 619
- 37) H. v. Groote and E. Hilf, Nucl.Phys. A129 (1969) 513
- 38) R.W. Hasse, Ann.Phys. 68 (1971) 377
- 39) H. Schultheis, R. Schultheis and G. Süßmann, Nucl.Phys. A144 (1970) 545
H. Schultheis and R. Schultheis, Physics Letters 34B (1971) 245,
35B (1971) 296
- 40) J.W. Negele and D. Vautherin, Phys. Rev. C5 (1972) 1472,
C11 (1975) 1031
- 41) T.L. Hill, J. Amer. Chem. Soc. 72 (1950) 3923
- 42) S. Kondo, J.Phys. Soc. Japan 10 (1955) 381
- 43) S. Ono, S. Kondo: Molecular Theory of Surface Tension in Liquids. Handbuch d. Physik X (Springer 1960)
- 44) J.W. Gibbs: Collected Works, Vol. 1 (New Haven, Yale University Press 1948)
- 45) A.O. Nier and T.R. Roberts, Phys. Rev. 81 (1951) 507
- 46) L.G. Smith and C.C. Damm, Rev.Sci.Inst. 27 (1956) 638

- 47) A.H. Wapstra and N.B. Grove, Nuclear Data Tables 9
(1971) No. 4-5, Acad. Press
- 48) M.A. Preston: Physics of the Nucleus (Addison-Wesley
Publish. Comp., Reading, Mass. 1962)
- 49) R. Hofstadter, Rev. Mod. Phys. 28 (1956) 214
- 50) J. Heisenberg, R. Hofstadter, J.S. McCarthy and I. Sick,
and B.C. Clark and R. Herman, and D.G. Ravenhall,
Phys. Rev. Letters 23 (1969) 1402
- 51) G. Gamow, Proc. Roy. Soc. London A126 (1930) 632
- 52) G.C. Wick, Nuovo Cimento 11 (1934) No. 4
- 53) W.D. Myers and W.J. Swiatecki, Nucl. Phys. 81 (1966) 1;
UCRL-Report 11980 (1965); Ark. Fys. 36 (1967) 343;
Proc. Lysekil Symp. "Why and How"
- 54) P. A. Seeger, Nucl. Phys. 25 (1961) 1
- 55) G. Süßmann, preprint 1967
- 56) G. Süßmann, private communication
- 57) K. Kumar, Perturbation-Theory and the Nuclear Many
Body Problem, North-Holland (Amsterdam) 1962
- 58) D.J. Thouless, Quantenmechanik der Vielteilchensysteme,
B I Hochschultaschenbücher, Bibliograph. Institut Mann-
heim, Bd. 52/52a
- 59) A. de Shalit and V. Weisskopf, Ann. Phys. (N.Y.) 5 (1958) 282
- 60) K.A. Brueckner and C.A. Levinson, Phys. Rev. 97 (1955) 1344
K.A. Brueckner, Phys. Rev. 97 (1955) 1353
- 61) K.A. Brueckner and J.L. Gammel, Phys. Rev. 109 (1958) 1023
- 62) J. Goldstone, Proc. Roy. Soc. (London) A 239 (1957) 267
- 63) R.J. Eden and V.J. Amery, Proc. Roy. Soc. (London)
A 248 (1968) 266
R.J. Eden, V.J. Amery and S. Sampanthar, Proc. Roy. Soc.
(London) A 253 (1959) 177, 186
- 64) H.A. Bethe, B.H. Brandow, A.G. Petschek, Phys. Rev. 129
(1963) 225

- 65) R. Rajaraman and H.A. Bethe, Rev. Mod. Phys. 39 (1967) 745
- 66) K.T.R. Davies, R.J. McCarthy and P.U. Sauer, Phys. Rev. C 6 (1972) 1461; Phys. Rev. C 7 (1973) 943
- 67) Ram K. Tripathi, H. Müther and A. Faessler, preprint 1973
- 68) K.A. Brueckner, J.L. Gammel and H. Weitzner, Phys. Rev. 110 (1958) 431
- 69) H.A. Bethe, Phys. Rev. 167 (1968) 879
- 70) S.A. Moszkowski and B.L. Scott, Ann. of Phys. 11 (1960) 65
- 71) J.W. Negele, Phys. Rev. C 1 (1970) 1260
- 72) H.S. Köhler, Nucl. Phys. A170 (1971) 88
- 73) D. Vautherin and D.M. Brink, Phys. Rev. C5 (1972) 626
- 74) T.H.R. Skyrme, Phil. Mag. 1 (1956) 1043; Nuc. Phys. 9 (1959) 615
- 75) K.A. Brueckner and T.D. Goldmann, Phys. Rev. 116 (1959) 424
- 76) G. Ripka: Vorlesungen gehalten beim 14. Internationalen Physikertreffen über "Fast Neutrons and the Study of Nuclear Structure" in Duilovo, Jugoslawien, 1969
- 77) N.M. Hugenholtz and L. van Hove, Physica 24 (1958) 363
- 78) K.A. Brueckner, A.M. Lockett and M. Rotenberg, Phys. Rev. 121 (1961) 255
- 79) K.G. Masterson and A.M. Lockett, Phys. Rev. 129 (1963) 776
- 80) G. Süßmann, Z. Phys. A 274 (1975) 145
- 81) H.D. Keller, Nucl. Phys. A175 (1971) 141
- 82) S.A. Moszkowski, The Skyrme Interaction in Nuclear Theory, Invited Talk presented at the Conference "Correlations in Nuclei", Balatonfüred, Hungary (1973)
- 83) J.C. Stoddart and N.H. March, Proc. Roy. Soc. London A299 (1967) 279
- 84) K.A. Brueckner, J.R. Buchner, S. Jorna and R.C. Lombard, Phys. Rev. 171 (1968) 1188
- 85) K. A. Brueckner, J.R. Buchler, R.C. Clark and R.J. Lombard, Phys. Rev. 181 (1969) 1543

- 86) J.C. Slater, Quantum Theory of Atomic Structure, Vol. II
(Mc Graw-Hill) New York
- 87) H.A. Bethe, Proc. Int. Conf. on Nucl. Phys., Gatlinburg,
Tenn. (1966)
- 88) W. Macke, Ann. Phys. 17 (1955), Heft 1
- 89) R. Berg and L. Wilets, Proc. Phys. Soc., London A 68
(1955) 229
- 90) R. Berg and L. Wilets, Phys. Rev. 101 (1956) 201
- 91) P. Gombas, Acta Phys. Hung 5 (1956) 483
P. Gombas, Ann. Phys. (6) 18 (1956) 1
- 92) S. Golden, Phys. Rev. 105 (1957) 604
- 93) D.A. Kirzhnits, Zh. Eksperim. Teor. Fiz 32 (1957) 115
in Russian, English in: Sov. Phys. JETP 5 (1957) 64
D.A. Kirzhnits, Field Theoretical Methods in Many-Body-
Systems, Pergamon Press, London 1967
- 94) A. S. Kompaneets and E.S. Pavlovskii, J. Exp. Theor.
Phys. 4 (1957) 328
- 95) L.C. Alfred, Phys. Rev. 121 (1961) 1275
- 96) M.J. Stephen and K. Zalewski, Proc. Roy. Soc. London
A 270 (1962) 435
- 97) H. Payne, Phys. Rev. 132 (1963) 2544
- 98) W. Macke and P. Rennert, Ann. Phys. 12 (1963) 84
- 99) K.L. Le Couteur, Proc. Phys. Soc. London 84 (1964) 837
- 100) N.L. Balazs, Phys. Rev. 134 (1964) A841
- 101) H.M. Schey and Y.L. Schwartz, Phys. Rev. 137 (1965) A709
- 102) K. Yonei and Y. Tomishima, J. Phys. Soc. Japan 20 (1965) 1051
- 103) Y. Tomishima and K. Yonei, J. Phys. Soc. Japan 21 (1966) 142
- 104) R.M. Wilcox, J. Math. Phys. 8 (1967) 962
- 105) R.J. Lombard, Ann. Phys. 77 (1973) 380
- 106) P. Gombas, Acta Phys. Hung. 25 (1968) 361
- 107) P. Gombas, Phys. Lett. 28A (1969) 585
- 108) J.C. Stoddart, A.M. Beattie and N.H. March, Int. J.
Quantum Chem. 4 S (1970) 35

- 109) W. Jones and W.H. Young, J. Phys. C 4 (1971) 1322
- 110) R. Baltin, Zeit.Naturf. 27a (1972) 1176
- 111) M. Abramowitz and I.A. Stegun: Handbook of Mathematical Functions. Dover Publications (New York 1965)
- 112) G. Süßmann, UCRL-Report 19960 (1970)
- 113) H. S. Köhler and Y.C. Lin, Nucl.Phys. A136 (1969) 35
- 114) T.M.R. Skyrme, Phil.Mag. 1 (1956) 1043
Nucl. Phys. 6 (1959) 615
- 115) M.A. Thorpe and D.J. Thouless, Nucl. Phys. A 156 (1970) 225
- 116) Ch. Gerthsen, Physik, Springer - Verlag, Berlin, Göttingen, Heidelberg, New York, 8. Auflage (1964)
- 117) R.V. Reid, Ann. of Phys. 50 (1968) 411

Danksagung

Meinen verehrten Lehrern, Herrn Prof. Dr. G. Süßmann und Herrn Universitätsdozent Dr. W. Stocker danke ich für die Anregung zu dieser Arbeit sowie für das dauernde Interesse an ihrem Fortgang. In vielen Diskussionen führten sie mich zur Lösung der auftretenden Schwierigkeiten und Probleme.

Auch den Herren Dr. K. Albrecht, Dr. R.W. Hasse, Dr. S. Knaak, Dr. G. Wegmann, Prof. Dr. M. Weigel und Dr. H.J. Winter sei an dieser Stelle für viele fördernde Gespräche gedankt.

Lebenslauf

Am 27. Februar 1947 wurde ich als Sohn des Amtsgerichtsrats Egmont v. Dewitz und der Ärztin Dr. med. Rosemarie v. Dewitz geb. v. Podewils in Berlin - Charlottenburg geboren. 1953 erfolgte meine Einschulung in die Grundschule, 1957 die Aufnahme in das humanistische "Evangelische Gymnasium zum Grauen Kloster." 1966 bestand ich dort die Reifeprüfung und begann im selben Jahr das Physikstudium an der Freien Universität Berlin. Drei Semester später nahm man mich in die "Studienstiftung des deutschen Volkes" auf. 1968 legte ich die Diplomvorprüfung ab und immatrikulierte mich anschliessend an der Ludwig - Maximilians - Universität München. Dort fertigte ich 1970/71 am Lehrstuhl Prof. Dr. G. Süßmann unter der Betreuung von Prof. Dr. K. Helmers meine Diplomarbeit an; es handelte sich dabei um eine feldtheoretische Untersuchung ("V0 - Sektor des Lee - Modells"). Im November 1971 erfolgte die Diplomprüfung. -

Meine Promotion begann im Juni 1972 unter der Betreuung von Herrn Prof. Dr. G. Süßmann und Herrn Universitätsdozent Dr. W. Stocker. Gefördert wurde ich seitdem durch Graduiertenstipendien der "Studienstiftung des deutschen Volkes" und der Ludwig - Maximilians - Universität München. - Herrn Prof. Dr. G. Süßmann gilt mein Dank für die Möglichkeit, ein halbes Jahr als wissenschaftliche Hilfskraft und ein Jahr als Verwalter einer wissenschaftlichen Assistentenstelle tätig gewesen zu sein.

